〔美〕G·Strang著

线性代数及其应用

侯自新　郑仲三　张延伦　译

南开大学出版社



责任编辑：黄立民

【科目196—330】
ISBN 7-310-00228-7/O·38
定 价： 3.80 元

线性代数及其应用

〔美〕G.Strang 著
侯自新 郑仲三 张延伦 译

南开大学出版社

内容提要

本书是作者在麻省理工学院长期使用的教材，结合应用讲授线性代数的基本理论，颇具特色。内容包括：高斯消元法，线性方程组的理论，正交射影和最小二乘，行列式，特征值和特征向量，正定矩阵，矩阵的计算，线性规划和对策论。

该书适于理工科以及统计、经济和管理各类不同层次的大学生研究生作为教材。也适合于有关高校师生及有关科技人员作为参考书。

Linear Algebra and Its Applications
Gilbert Strang
Academic Press, New York, 1976

线性代数及其应用

C.Strang 著

侯自新 等译

南开大学出版社出版
（天津八里台南开大学校内）
邮政编码300071 电话34,9318
新华书店天津发行所发行
河北省邮电印刷厂印刷

1990年4月第1版 1990年4月第1次印刷
开本：850×1168 1/32 印张：15.25 插页：2
字数：378千 印数：1—5 000
ISBN7-310-00223-7/O-38 定价：3.90元

俄译本校订者序

传统的线性代数课本和参考书都很少涉及应用，而计算数学中一切方法无例外地都以线性代数为基础。从这个意义上，可以说线性代数是完全的应用学科。

本书是著名美国数学家斯特让（G.Strang)根据他在麻省理工学院所用讲义写成的。他的讲义充分考虑了线性代数的应用性质，在内容的选择和讲法上都与传统方式有实质性的不同。例如，高斯消去法，正定矩阵，线性规划都各辟为单独的一章，而线性变换和矩阵的约当标准形又只作为简短的附录。书中也讲了向量在子空间上的正交射影和有限元方法。当前，有限元方法是数理方程近似解法的基本工具，有专门的一章讲矩阵计算和线性方程组的迭代解法。迭代解法在计算数学中起着重要的作用。

每章都有着大量的例题和习题，用来培养和提高读者解应用题的习惯和能力。

本书文字叙述充分，适用范围广泛。对数学应用工作者，对综合性大学和工科院校中很多专业的研究生、大学生都适用。线性代数教师不仅会感兴趣于它的讲法，更会感兴趣于它所实现的理论与应用的结合。

Г.И.Марчук

中译者的话

G.Strang编著的《线性代数及其应用》十年前问世以来，很快就受到各国数学工作者及广大科技人员的重视。出版不久就被译成俄、日等文字出版。苏联著名的数学家、计算数学权威Г.И.Марчук还专门为俄译本写了序言。在1980年美国又发行了第二版。

这本书是作者在麻省理工学院多年所用的讲稿的基础上撰写的。它之所以被广为重视，其重要原因是在很大程度上突破了线性代数的传统讲法，作者力图将线性代数的抽象性与其应用性有机地结合起来，既保持了理论上的严谨，又尽可能早地介绍有关理论的应用，并精选了一批有关其它数学以及物理和经济等领域的例子。这就不仅使数学工作者更多地了解线性代数的应用，而且也为广大从事实际工作的科技人员和管理人员能更快更好地应用线性代数提供了一本极好的教材。

为了使本教材适用各个方面不同水平的读者，本书在讲法上也做了新的尝试。努力用语言讲清数学思想之真谛，而避免过多的形式逻辑的推导。并把一部份比较更抽象但也是很重要的理论放在附录中去讲，这样做不仅保证理论体系的完整，也为不同专业在选材上提供了方便。

基于上述理由，我们觉得将这样一本有价值的教材介绍给我国读者是很有必要的。特别是近20多年以来，由于电子计算机的飞速发展和广泛应用，线性代数已成为越来越多的科技工作者必不可少的数学工具。我们相信这本书在这方面必将对大家有所帮助。

本书第1、2、4章和序由张廷伦，第6、7、8章由郑仲三译，第3、5章和附录由侯自新译。侯自新并负责全文的通校。

由于我们水平有限，译文难免有误，敬请读者指正。

序

现行线性代数课本都过于抽象。这种看法也许武断了些，但我确信线性代数课本应该既能讲清楚该学科的基本理论，又能表明该学科具有如同微积分一样的基础作用和实用价值。

当然，线性代数课本现状的形成是有它的道理的，也即由于这一入门学科立论的准确和证明的严格。我充分地意识到了这两点，并力求在我们的教学中一丝不苟地保持它。我在麻省理工学院所试行的教法表明，线性代数还具有另外一个同样重要的特点，这就是它不只允许，而且是更为适于将数学的两大因素——抽象和应用结合起来。

目前多数的学生，特别是非数学系的学生，根本不学这门课，而学这门课的学生也只在抽象的方面绞脑汁，却并不接触应用。结果是，甚至我们那些最好的学生也只在抽象的方面拿手，而在计算方面却十分蹩脚。例如，解线性方程组，他们用克莱姆规则，对特征值他们只知道那是特征方程的根。这种情况要求我们教学要实用些，开阔些。

我希望把线性代数写成为不同方面不同水平的学生都能用。这不是说要把它写成食谱，而是说不把注意力只集中在线性代数自身的严格上，而是更多地注意讲解，也即更注重的是解释而不是推导。一些定义是按传统方式给出来的，而有些则是在讨论过程中形成的。同样地，一些证明是按部就班严格进行的，但不都是这样。不管怎么样，基本理论我们都是重视的，它是核心，只是有时用例子来导出它，并用例子来加深对它的理解。

讲线性代数课首先遇到的难点是怎么开头。学这门课程的大多数学生，都不同程度地学过线性方程组。尽管这样，我们相信本课还是应该从 n 个未知数 n 个方程这一基本问题开始，从最简单最实

用的高斯消去法（不是行列式法！）开始。好在，这一虽是简单的方法中却包含着一些对几乎每一个学生来说都是新鲜的，属于线性代数的本质部分的东西。其中最重要的一件是消去法等价于矩阵因式分解，即等价于将系数矩阵变换为三角阵的乘积。由此可以自然地导出矩阵记号和矩阵乘法。

再一个难点是如何掌握进度。如果矩阵计算是已经熟悉了的，那么，第一章就不应该太慢，第二章是要求下功夫的章，这一章的目标是对方程$Ax=b$有透彻的、比从消去法得到的有更加深入的理解。这一章引入了A的行空间、列空间、它们的正交补和两个化零空间。这四种基本子空间的引入，对于得到线性相关和线性无关的例子，以及对于基底、维数和秩的解释都是行之有效的方式。当然这四种子空间也是理解$Ax=b$的得力工具，正交化是大家熟悉的三维空间几何向n维的自然推广。

第1～5章是线性代数课程的基本内容，这几章中有着大量的应用，这些应用涉及物理、工程、概率与统计、经济和生物等多方面（还有对甲烷分子结构和心理学上因子分析的应用，这两种应用是我的麻省理工学院同事们所绝对不讲的）。当然，本书不可能讲到矩阵的所有应用。它只是一本线性代数的入门教科书。讲到所有的应用，这也不是我们的目标，我们的目标是为应用做好准备，而且只是为应用在理论方面作好准备。

应用所需理论，本书中是齐备了。第2章讲过向量空间之后，第3章讲射影和内积，第4章讲行列式，第5章讲特征值。我们希望工程师和其他一些对应用感兴趣的读者特别地细读第5章。这一章中集中讲了对角化的应用，其中包括谱定理，只是把约当标准形分了出来，安排在附录中。前五章，每一章的最后都有一组复习题，每一章的最后一节都是机动的。讲广义逆矩阵的§3.4也是用做机动的。用来作为一个学期或半个学期课程时，第6章（正定矩阵）或第8章（线性规划）是否要讲，得由教师视具体情况而定。§8.1和§8.4分别是对线性规划和对策论的一个简短而有益的介

绍*。

作为基础线性代数教材的本书，可以从中抽出三种完全不同的教材来。一种是数值线性代数，这包括第1章的全部、第2～6章的基本内容、讲计算的第7章和讲单纯形法的§8.2。再一种是“统计线性代数”，应该细讲第3、6两章，第三种是把不等式视为方程的那些学科，如经济学方面的教材，此时应该尽快地从$Ax=b$过渡到线性规划和对偶性。

我们期望着讲授基础线性代数的同行们乐于采用本书，编写本书的根本意图也正在于此。希望他们不会因为，特别是在第1章中出现的一些计算数学用语，诸如“计算次数”等而将本书弃置不顾。从实用角度看，计算数学的这种知识无疑是重要的。即使从理论角度看，这种知识也非无足轻重。例如，对运算次数的计算可以加深对消去法过程的实际掌握，我每教本课，都在第一或第二次的课堂上正式要学生计算消去法的运算次数。关于运算次数等这样一些面对计算机的概念课堂上无需进行讨论，任何一本教科书都应该由讲义总结而成，也都应该有讲义作补充。

总之，需要一本结合应用来成功地讲授基本理论的教科书。我们努力完成的就是这样一本书。

本书的出版，多承Tom Slobko鼓励，Ursula为本书打字，我的家庭为我提供条件，谨在此一并深表谢意。谨把此书奉献给我报答不尽的双亲，他们对此书的贡献最大，感谢他们。

G.Strang

---

* 根据俄译本，又补进作者提供的网络内容——译者注。

目 录

第一章　高斯消去法

§1.1　引　　言

线性代数的核心问题是解联立线性方程组。未知数的个数与方程的个数相等的联立方程组，是最重要的，也是最简单的，我们就从这样的联立方程组讲起。

解联立方程组，较为初等的课本中有不同的两种方法。一种是消去法：先消去第一个方程以外各方程中的第一个未知数。办法是从这以外的每一个方程中减去第一个方程的适当倍数。这样我们就得到一个$n-1$个未知数、$n-1$个方程的方程组。对新得到的变小了的方程组再应用刚才的办法。重复下去，直至得到一个未知数一个方程的方程组。它的解就立即可以写出了。用反向代入的回推方法，不难求出所有的未知数。后文内，我们举一个应用消去法的例子。另一种方法，更为理论一些，要用到行列式，得到的是精确解，是两个n阶行列式的比。称这个比为Cramer(克莱姆)规则。从一般教科书上所举的例子(人们应用Cramer规则的上限是$n=3$或$n=4$)中，看不出两种方法哪一种更好。

事实上，对数值大的n，Cramer规则不可能实际应用。而对实际中遇到的方程组，即使n够大，消去法也可以求出它的解来。消去法是一种算法，我们的第一件事是讲这个算法。一般地，称这个算法为Gauss（高斯）消去法。

Gauss消去法很是简单，读者可能已经熟悉了。但有比消去法本身更为重要的四点。本章要讲的正是消去法本身和这四点。这四点是：

(1)消去法可以解释为系数矩阵的因式分解。我们引进联立方程组的矩阵表示，即记n个未知数为向量x，记n个常数为向量

b，记全体系数为矩阵A，则联立方程组可记为$Ax=b$。在这样的表示方法之下，消去法就相当于把矩阵A分解为下三角矩阵L和上三角矩阵U的乘积LU。这是基本的，也是很有用的一点。

当然，我们将要系统地讲向量和矩阵，以及它们的乘法。还将要定义矩阵A的转置矩阵A^T和逆矩阵A^{-1}。

（2）在大多数情况下，消去法都可以原样应用，不产生任何困难就可以得到方程组的解。有两种情况例外。一种是方程在组中的次序要变动，变动之后可以得到方程组的解；另一种是方程组$Ax=b$没有唯一解。此时可以是无解，可以是有无穷多解。消去法本身可以判断出是无解，还是有无穷多解。

（3）用消去法解方程组时，对所需的算术运算次数很有必要有一个估计。在许多实际问题中，所引进的未知数的个数都是由数学模型的准确程度和运算次数共同决定的。

（4）我们还将直观地考察一下舍入误差对解x的影响是否显著。对影响显著的问题，就应设法控制舍入误差。电子计算机每次运算都把结果舍入成固定的位数。对影响显著的问题，如不适当控制舍入误差，那么经过千次，万次，甚至几万次运算，所得到的解会是完全无意义的。

本章要求读者掌握消去法，它行之有效，在实际中应用广泛。我们是借助矩阵来讲消去法的。矩阵是所讲理论的基础。我们用到了系数矩阵，消去步骤的矩阵表示，行交换的矩阵表示，以及三角矩阵因子等。

§1.2 Gauss消去法举例

我们通过例子来讲这一方法。先看一个三维方程组

$$\begin{aligned} 2u+v+w&=1\\ 4u+v&=-2\\ -2u+2v+w&=7 \end{aligned}\qquad (1)$$

我们用Gauss消去法（Gauss被认为是最伟大的数学家，当然不是因为这个可能只用了他几分钟的消去法。但幽默的是，Gauss的名字因这个方法被提到的次数却最多）来求未知数u、v和w的值。做法是从第二、三两个方程中减去第一个方程的适当倍数，使得第二、三两个方程中的u被消去，也即

（a）从第二个方程中减去第一个的2倍；

（b）从第三个方程中减去第一个的-1倍。

结果得到等价方程组

$$\begin{aligned} 2u+v+w&=1\\ -v-2w&=-4\\ 3v+2w&=8 \end{aligned} \qquad (2)$$

第一个方程中u的系数2称为消去法第一步的主元素。

消去法第二步不考虑第一个方程。剩下的是含有未知数v，w的两个方程。对这两个方程我们照第一步再进行消去。这一步的主元是-1。要从其余的方程中减去这第二个方程的倍数（这里其余的方程只有第三个方程一个），以消去v。也即

（c）从第三个方程中减去第二个的-3倍。"正向"消去已经完成。结果得到一个化简了的方程组

$$\begin{aligned} 2u+v+w&=1\\ -v-2w&=-4\\ -4w&=-4 \end{aligned} \qquad (3)$$

该方程组的解法是明显的。由最后一个方程得$w=1$；代$w=1$入第二个方程得$v=2$；代$w=1$，$v=2$入第一个方程得$u=-1$。称这个代入过程为反向代入。

上述求解过程不难推广到n个未知数n个方程的情形，n多大都可以。第一步利用第一个方程的倍数消去第一个主元素正下方的所有系数。第二步消去第二列中第二个主元素正下方的所有系数、类推。最后得到含有一个未知数的一个方程。反向代入按反次序得到答案。即最先得到最后一个未知数。再得到倒数第二个，最后得

到第一个未知数。

练习1.2.1 用消去和反向代入解方程组

$$\begin{aligned} 2u-3v \quad\quad &= 3 \\ 4u-5v+\ w &= 7 \\ 2u-\ v-3w &= 5 \end{aligned}$$

写出主元素，列出从其余的行中减去一行倍数的三个运算。

练习1.2.2 解方程组

$$\begin{aligned} 2u-\ v \quad\quad\quad\quad &= 0 \\ -u+2v-\ w \quad\quad &= 0 \\ -\ v+2w-\ z &= 0 \\ -\ w+2z &= 5 \end{aligned}$$

我们问两个问题。可能是问得早了一些，这里我们是刚刚接触到这个消去法。但是对这两个问题的回答会使我们对消去法本身有更进一步的理解。第一个问题是，用消去法一定能得到方程组的解吗？在什么条件下消去法行不通？回答是，如果主元素都不为零，则方程组有唯一解，并可用正向消去和反向代入求得。遇到主元素为零，则消去法不能进行。

例如，第一个主元素为零，那就不能用第一个方程消去其它方程中的 u。别的主元素为零时，情况也类似。我们指出，即使构成主元素的系数在原方程中本来不为零，经过消去法的一步或几步之后也可能遇到为零的主元素（练习1.2.3中就是此情形）。粗略地说，不到消去法进行到最后一步，我们回答不了主元素是不是都不为零。

遇到主元素为零时，在多数情况下，经过调整，仍然可以用消去法求得方程组的唯一解。当然，方程组无解或者有无穷多解时，消去法肯定是不能进行到底的。

不能进行到底的问题，我们把它留到后面再加以分析。

第二个问题很实际，事实上它是关于算题费用的。这第二个问题是：用消去法解 n 个未知数 n 个方程的方程组，需进行多少次算

术运算？如果 n 很大，那就必须由计算机来完成消去法（你可以利用现成的消去法程序，或者你可以自己编一个），由于步骤是事先知道的，因而也就能够事先算出所需的机器时间。我们先不管方程组的右端部分，只对左端所需的计算次数进行估算。这里的运算有两类，一类是除法，用来确定从主元下面的方程中应减去主元所在方程的倍数（比如 l 倍）。在进行两个方程相减时，要做的是"先乘后减"，即先用 l 乘主元所在方程，再从主元下面的方程中减去乘上了 l 的主元所在方程。

我们约定把每一个除法和每一个"先乘后减"都叫做一次运算。第一步时，第一个方程的长度是 n，每消去第一列的一个元素，要做 n 次运算（求倍数 l 一次，算出被消去元素所在行的新元素 $n-1$ 次）。第一行下面共 $n-1$ 行，要消去的元素是 $n-1$ 个。因而，消去法第一步要进行 $n(n-1)=n^2-n$ 次运算。完成了第一步，第一行第一列可以先不管。进行第二步时，方程和未知数的个数都是 $n-1$。接下去每做一步方程和未知数的个数都减 1，运算次数也随之减小。到剩下 k 个未知数 k 个方程时，消去主元素正下方元素所需的运算次数是 $k(k-1)=k^2-k$。理由跟第一步，即 $k=n$ 时一样。因而方程组左边部分所需的算术运算总次数为

$$P=(n^2-n)+\cdots+(k^2-k)+\cdots+(1^2-1).$$

（注意，最后一步，即一个未知数一个方程时，不需进行计算，$1^2-1=0$）。我们来算出和数 P

$$P=\sum_1^n k^2-\sum_1^n k=\frac{1}{3}n\left(n+\frac{1}{2}\right)(n+1)$$

$$-\frac{1}{2}n(n+1)=\frac{n^3-n}{3}.$$

（可以用微积分来检验所得结果。x^2 的从 0 到 n 的积分为 $n^3/3$，x 的从 0 到 1 的积分为 $n^2/2$。恰是两个和号下结果的主项）。如果 n 够大，那么 $P\approx n^3/3$ 就是运算次数的一个很好的估计量。

反向代入所需运算次数的计算要容易得多。求最后一个未知数

所需运算次数为 1（用最后一个主元素去除），求倒数第二个未知数所需运算次数为 2（一个先乘后减一个除）。类推，求倒数第 k 个未知数所需运算次数为 k。因而反向代入所需总运算次数为

$$Q=\sum_{k=1}^{n} k=\frac{1}{2}n(n+1)\approx\frac{n^2}{2}$$

人们曾经认为求得的这两个数就是最好的了，即求解一般的 n 阶方程组所需的乘法运算的次数不可能少于$n^3/3$。不久以前，数学家们还几乎都这么猜测（甚至有定理对这一点加以证明。但这些定理只涉及某些方法）。令大家震惊的是，这个猜测被证明是错的。人们找到了一种方法，它只需要$Cn^{\log_2 7}$次运算！对消去法来说，上述常数C是大的，且所需进行的加法次数要很多，计算机程序又太复杂，因而新方法的重大意义还只是理论上的，实践上代替不了消去法。指数能否减小，人们似乎还一无所知。

练习1.2.3 试用消去法解方程组

$$\begin{aligned} u+v+w&=-2\\ 3u+3v-w&=6\\ u-v+w&=-1 \end{aligned}$$

遇到为零主元素时，请将它所在方程与下面的方程对调。然后继续进行消去。问：第三个方程中 v 的系数-1换为什么数，消去法将不能进行。

练习1.2.4 $n=2$ 时$P=2$。试列出用消去法解方程组

$$\begin{aligned} au+bv&=0\\ cu+dv&=1 \end{aligned}$$

时，对左端所进行的运算。

练习1.2.5 设解线性方程组所需运算次数为$n^3/3$，计算机的速度为每秒一百万次，收费标准为每小时1000元。试问化 1 元钱可以解多大的方程组，化1000元可以解多大的方程组？

练习1.2.6（非必做题） 两个复数相乘，通常是

$$(a+ib)(c+id)=(ac-bd)+i(bc+ad)$$

包含四个乘法运算ac，bd，bc，ad。不计i，试问能否用三个乘法算出量$ac-bd$和$bc+ad$。（进行乘法之外，可以进行诸如$a+b$这样的运算，而不计入运算次数）。

练习1.2.7 试用消去法解

$$\begin{aligned} u+v+w&=6\\ u+2v+2w&=11\\ 2v+3v-4w&=3. \end{aligned}$$

§1.3 矩阵和矩阵乘法

前面，我们处理的最大的方程组是3×3的．我们可以照原样把方程组写出来，甚至可以把消去法的每一步也详细写出来。把为化简方程组而从一个方程减去另一个方程的倍数称为一步。对大的方程组，要详细地把消去法的步骤写出来就不可能了，需要简单的记号。我们将用矩阵来描述方程组，用矩阵乘法来描述化简方程组的运算。

下例中

$$\begin{aligned} 2u+v+w&=1\\ 4u+v&=-2\\ -2u+2v+w&=7 \end{aligned}$$

有三种不同类型的量。一类是未知数u，v，w；再一类是右端的1，-2，7；最后是左端的九个系数（此处，它们中间有一个为零）。对右端的一列数（方程的非齐次项）我们引进向量符号来记它

$$b=\begin{bmatrix}1\\-2\\7\end{bmatrix}.$$

这是一个三维列向量。几何上用三维空间中的点表示三维向量，取它的三个分量作为三维空间中一个点的坐标。三维空间中的每一个

点都对应于一个三维向量（可以形象地用一个箭号或一个线段来表示，起点在坐标原点，终点在它所对应的点处）。

向量的基本运算是两个向量相加和纯量乘向量。几何上，向量$2b$的方向与b相同，长度是b的2倍；向量$-2b$的方向与b相反；把向量c的始点移到向量b的终点上，那么以b的始点为始点，以c的终点为终点的向量就是$b+c$。代数上，这意味着向量的运算是对分量进行的。

$$2b=2\begin{bmatrix}1\\-2\\7\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2\\-4\\14\end{bmatrix},\quad -2b=\begin{bmatrix}-2\\4\\-14\end{bmatrix},$$

$$b+c=\begin{bmatrix}1\\-2\\7\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}1\\-4\\-4\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2\\-6\\3\end{bmatrix}.$$

两个向量只在它们的维数，也即分量个数相同时才能相加。

方程组中的三个未知数也可以用向量表示

$$未知数为\ x=\begin{bmatrix}u\\v\\w\end{bmatrix};\quad 解为\ x=\begin{bmatrix}-1\\2\\1\end{bmatrix}.$$

这两个向量也是三维向量。对摆定了位置的九个系数我们引进一个三行三列"矩阵"，称它为系数矩阵。

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}2&1&1\\4&1&0\\-2&2&1\end{bmatrix}.$$

我们指出，由于我们的例子中方程的个数与未知数的个数相同，都是三个，因而A是一个三阶方阵。一般地，对n个方程n个未知数的方程组，有n阶系数方阵。更一般地，对m个方程n个未知数的方程组，我们有矩形的系数矩阵（行数为m列数为n），也称为$m\times n$矩阵。

矩阵也可以相加或乘上一个纯量常数。也与向量一样，运算是

对元素进行的。事实上，我们可以把向量看成矩阵的特殊情形。列向量是列数为1的矩阵。与向量一样，矩阵只在行数列数都相同时才能相加：

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 3 & 0 \\ 0 & 4 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ -3 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 3 \\ 0 & 1 \\ 1 & 6 \end{bmatrix},$$

$$2\begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 3 & 0 \\ 0 & 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & 2 \\ 6 & 0 \\ 0 & 8 \end{bmatrix}$$

矩阵与向量相乘

现在我们就来应用上面引进的符号。三个方程三个未知数的方程组(1)，用矩阵和向量符号写出来就是$Ax=b$。把元素都写出来，就是

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 4 & 1 & 0 \\ -2 & 2 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \\ 7 \end{bmatrix}.$$

右端是非齐次项所成的列向量。左端是向量x左乘以矩阵A。显然，这个乘法应该使我们回到原方程组(1)。因而乘积Ax的第一个分量应该是A的第一行乘上列向量x

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} = [2u+v+w]. \qquad (4)$$

让它等于b的第一个分量，得$2u+v+w=1$，正是组(1)的第一个方程。乘积Ax的第二个分量$4u+v$由A的第二行决定，第三个分量$-2u+2v+w$由A的第三行决定。这样矩阵方程$Ax=b$就确实地等价于方程组(1)。

(4)中的运算是矩阵乘法的基础。该运算规定行向量与一个维数相同的列向量相乘，乘积是一个数。称这一个数为这两个向量的内积、数积，或点积。换句话说，$1\times n$矩阵(行向量)与$n\times 1$

矩阵（列向量）的乘积是一个 1 × 1 矩阵。

$$(a_1 \ \ a_2 \cdots a_n)\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} = (a_1b_1 + a_2b_2 + \cdots + a_nb_n).$$

例

$$(2 \quad 4 \quad 1)\begin{bmatrix} 3 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix} = (2).$$

矩阵与向量相乘的规则，可以直接从我们讨论过的三维情形推广到一般的 n 维情形，向量的分量个数必须也是 n，即必须等于矩阵 A 的行数。用字母表示 A 和 x 的元素，则乘积

$$\mathbf{A}x = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} a_{11}x_1 + \cdots + a_{1n}x_n \\ a_{21}x + \cdots + a_{2n}x_n \\ \vdots \quad + \cdots + \quad \vdots \\ a_{n1}x_1 + \cdots + a_{nn}x_n \end{bmatrix}.$$

注意，我们记矩阵的元素为 a_{ij}，前一个下标为元素所在行的行数，后一个下标为元素所在列的列数。a_{ij} 是第 i 行第 j 列处的元素。我们可用求和符号

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j$$

表示 Ax 的第 i 个分量。用求和符号比直接写出要简单，但不如用矩阵符号简单。

例

$$A=\begin{bmatrix}2 & 3\\ 4 & 0\end{bmatrix},\quad x=\begin{bmatrix}1\\ 5\end{bmatrix}$$

$$Ax=\begin{bmatrix}(2)(1)+(3)(5)\\ (4)(1)+(0)(5)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}17\\ 4\end{bmatrix}. \tag{5}$$

我们看到，Ax实际上是A的两列的线性组合，每一列都乘上了x的对应分量。换句话说，可以按下述方式算出Ax的元素

$$Ax=\begin{bmatrix}2\\ 4\end{bmatrix}(1)+\begin{bmatrix}3\\ 0\end{bmatrix}(5)=\begin{bmatrix}17\\ 4\end{bmatrix}. \tag{6}$$

这一规则将用于全书，因而我们再重复一遍：我们可以如(5)那样利用A的单个元素，也可以照下面这样利用A的列来求Ax

$$\begin{bmatrix}2 & 1 & 1\\ 4 & 1 & 0\\ -2 & 2 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}-1\\ 2\\ 1\end{bmatrix}=(-1)\begin{bmatrix}2\\ 4\\ -2\end{bmatrix}+2\begin{bmatrix}1\\ 1\\ 2\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}1\\ 0\\ 1\end{bmatrix}.$$

积Ax是A的列的线性组合，在我们的例子中这线性组合等于

$$b=\begin{bmatrix}1\\ -2\\ 7\end{bmatrix},\ 从而\ x=\begin{bmatrix}-1\\ 2\\ 1\end{bmatrix}$$

是Ax的解。

练习1.3.1 先用A的单个元素再利用A的整列计算乘积

$$Ax=\begin{bmatrix}4 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\\ 4 & 0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}3\\ 4\\ 5\end{bmatrix}$$

练习1.3.2 试计算乘积

$$Ax=\begin{bmatrix}1 & 2\\ 3 & -3\\ 0 & 4\\ 0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\ -1\end{bmatrix}\ 和\ \begin{bmatrix}-4 & 1 & 3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}-4\\ 1\\ 3\end{bmatrix}.$$

如果A是$m\times n$矩阵，x是n维向量，试问乘积Ax的行数列数各为

几？

练习1.3.3 假定某年年初与年末相比较

(a)原来住在美国加州的人中80%留在加州，20%迁出加州。

(b)原来住美国国内加州以外的人中90%仍留在加州以外，10%迁入加州。

试根据以上两条将下列问题用“矩阵形式”表达出来，并求解。

(i)年初美国加州内外人数分别为30和200(单位百万，下同)，问年末州内州外人数各若干？

(ii)年末州内州外人数分别为30和200，问年初州内州外人数各若干？

(iii)问年初人口是怎样一种分布时，年末人口分布不变，换句话说，要求年末时州内外人口数 u，v 与年初时相同，年初时 u 和 v 应是多少？

练习1.3.4 画出互相垂直的两根轴，也即建立一个坐标系。先标出点 $x=2$，$y=1$ 和 $x=0$，$y=3$，再画出从原点到这两点的向量，最后画出这两个向量的和，并补全平行四边形。

对习题1.3.3我们做两点说明，一点是强调一下问题的线性性。如果人数加倍成60，400，那么答数也加倍；如果对人数40，250求出解，那么人数为70(=30+40)，450(=200+250)时的解恰好是人数为30，200和40，250这两种情况下解的和。

第二点说明是关于题中(ii)。(ii)要求我们算出美国加州内外年初的人数 u 和 v。应该列出两个方程。你大概会先列出年末时州内人数应满足的方程。$.8u+.1v=30$，再列出年末州外人数应满足的方程 $.2u+.9v=200$。第二点说明是，可以利用同时涉及两个方程的“时间列”。目的是求出年初的人口数。使得年末时州内外人口数所成向量为 $b=\begin{bmatrix}30\\200\end{bmatrix}$。州内年初人口数 u，年末分住州内外情形为 $\begin{bmatrix}.8u\\.2u\end{bmatrix}$。州外年初人口数 v，年末分住州内外情形为 $\begin{bmatrix}.1v\\.9v\end{bmatrix}$。这两个

向量的和应为 b，即

$$u\begin{bmatrix} .8 \\ .2 \end{bmatrix}+v\begin{bmatrix} .1 \\ .9 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 30 \\ 200 \end{bmatrix}.$$

这样我们的问题就成了求出左端两列的权 u 和 v，使得左端等于右端向量 b。(iii)是求出权 u 和 v，使得左端等于权本身$\begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}$，也即年末时州内外人口数同于年初。

消去法运算的矩阵表示

对线性方程组我们有了简单的记法$Ax=b$。对消去法运算有没有简单记法呢？在所举的例子中，第一步是从第二个方程中减去第一个的两倍，在右端也就是从第二个分量中减去第一个的两倍。我们指出，对右端的这一运算等于用矩阵

$$E=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

去乘向量b。可以根据矩阵与向量相乘的法则进行验证，

$$Eb=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 \\ -2 \\ 7 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1 \\ -4 \\ 7 \end{bmatrix}.$$

第一、三两个分量 1 和 7 不变（这是由E中我们所选定的一、三两行所决定的）。第二个分量成了-4，与消去法第一步之后方程(2)中第二个分量相同。

为保持方程组两端相等，Ax的左端也应左乘上矩阵E。这一乘法对左端的作用是从第二个分量减去第一个的两倍，第一、三两个分量不变。经过这一步之后，方程组变成了$E(Ax)=Eb$。它与原方程等价，但简单了一些。说它简单了一些，是因为第一个**主元素**下方的那个元素变成了零。说它与原方程等价，是因为把第一个方程的 2 倍加到第二个方程上去就恢复为原方程，因而新旧方程组有相同的解 x。这也是高斯消去法可以应用的理由。经过正向消去之

后，解不变，但却可以用反向代入法很容易地求出。

矩阵乘法

现在我们要问：新方程$E(Ax)=Eb$的系数矩阵是什么？用左乘以矩阵E表示的消去法第一步运算把系数矩阵

$$A=\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 4 & 1 & 0 \\ -2 & 2 & 1 \end{bmatrix}$$

变成了新的系数矩阵

$$EA=\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 0 & -1 & -2 \\ -2 & 2 & 1 \end{bmatrix}.$$

该矩阵与原矩阵相比较，也是第一、三两行照旧，只是从第二行中减去了第一行的两倍。新的系数矩阵把先用原来的系数矩阵A乘x，再用E乘Ax合并成了一步。称新矩阵为原来两个矩阵的乘积，记为EA。注意EA中两个矩阵的次序不能颠倒。再重复一遍：

1A 乘积EA是一个矩阵，它相当于先用A乘再用E乘，即对每一个向量x我们都有

$$(EA)x=E(Ax) \tag{7}$$

由这一规则我们可以推出图1.1.和方程(8)中的矩阵乘法法则。

假定给了任何两个矩阵E和A，行数可以不等于列数。我们怎样利用上述规则来计算乘积EA呢？首先E和A的行数列数必须使得乘法能够进行：如果E，A都是方阵，则它们的阶数须相同；如果E，A不是方阵，那么E的列数必须等于A的行数。换句话说，E是$l\times m$矩阵，A是$m\times n$矩阵时（E的列数等于A的行数，都是m）才能相乘。此时(7)式右端由n维向量x开始，Ax产生m维向量，最后EAx的分量个数是l（我们去掉了EAx中的括号，式(7)的作用正是去掉其左端括号的）。乘积EA的行数同于E，为l，列数同于A为n，也即$l\times m$矩阵乘上$m\times n$矩阵得$l\times n$矩阵。

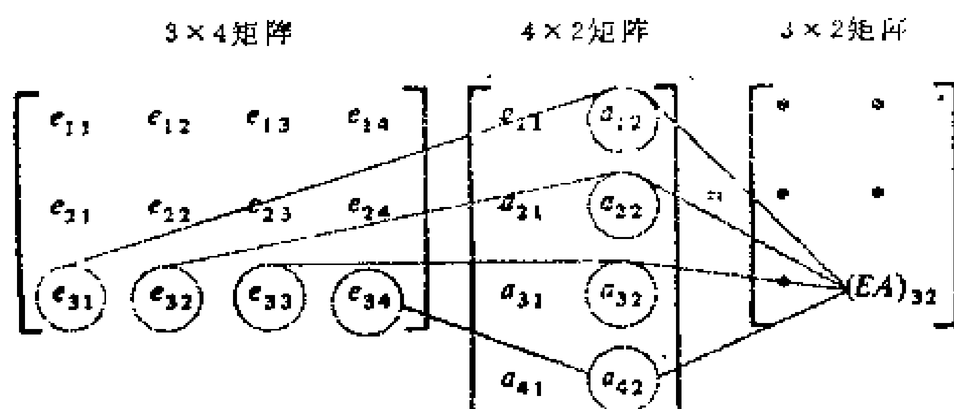


图 1.1 矩阵乘法示意图

我们实际地计算EA，方法是每次算出EA的一个元素。单个元素的计算规则是：EA第 i 行第 j 列处的元素是E第 i 行与A 第 j 列的内积。图1.1上画出了E的最后一行和A的最后一列上的元素，它们的内积是EA最后一行最后一列处的元素。

$$(EA)_{32}=[e_{31}\ e_{32}\ e_{33}\ e_{34}]\begin{bmatrix}a_{12}\\a_{22}\\a_{32}\\a_{42}\end{bmatrix}$$

$$=e_{31}a_{12}+e_{32}a_{22}+e_{33}a_{32}+e_{34}a_{42} \qquad (8)$$

例 1

$$\begin{bmatrix}2&3\\4&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&2&0\\5&-1&0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}17&1&0\\4&8&0\end{bmatrix}.$$

例如，元素17是E的第一行与A的第一列的内积，$(2)(1)+(3)(5)$；元素 8 是E的第二行与A的第二列的内积，$(4)(2)+(0)(-1)$。A的最后一列为零，因而EA的最后一列也为零。

例 2

$$\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}2&3\\7&8\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}7&8\\2&3\end{bmatrix}.$$

这里的E使A的两行互换位置。

练习1.3.5 试求E和A的乘积

$$E=\begin{bmatrix}1&0&0\\-2&1&0\\1&0&1\end{bmatrix},\quad A=\begin{bmatrix}2&1&1\\4&1&0\\-2&2&1\end{bmatrix}$$

练习1.3.6 试求 E 和 A 的积

$$E=\begin{bmatrix}1&0&0\\-2&1&0\\-5&3&1\end{bmatrix},\quad A=\begin{bmatrix}2&1&1\\4&1&0\\-2&2&1\end{bmatrix}.$$

练习1.3.7 试将 1×2 矩阵 $E=[1\quad -4]$ 与 2×1 矩阵 $A=\begin{bmatrix}4\\1\end{bmatrix}$ 相乘，当 E 是 $l\times m$ 矩阵，A 是 $m\times n$ 矩阵时，为得到乘积 EA 所需进行的单个乘法为 lmn 个。试说明理由。

练习1.3.8 试将下面的 3×2 矩阵 E 与 2×1 矩阵 A 相乘

$$E=\begin{bmatrix}8&-3\\-5&2\\1&0\end{bmatrix},\quad A=\begin{bmatrix}2\\1\end{bmatrix}.$$

我们指出，最后这一练习实际上是矩阵与向量相乘。它的计算规则与 Ax 的计算规则是一致的。

进一步，与 Ax 一样，积 EA 也可以按列进行计算。例如 EA 的第一列恰是 E 乘上 A 的第一列。再来看下例

$$\begin{bmatrix}2&3\\4&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&2&0\\5&-1&0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}17&1&0\\4&8&0\end{bmatrix}.$$

逐列算出乘积，我们得到

$$\begin{bmatrix}2&3\\4&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\5\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}17\\4\end{bmatrix},\quad\begin{bmatrix}2&3\\4&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}2\\-1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1\\8\end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix}2&3\\4&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\0\end{bmatrix}.$$

这说明了重要的一点：EA 的第 j 列只依赖于 A 的第 j 列，而与 A 的别的列全无关系。进一步，EA 的这第 j 列又是 E 的各列的组合，组合的权是 A 的第 j 列上的元素 a_{ij}。这样，两个矩阵相乘的规则就成

了前面讲过的矩阵与向量相乘规则的推广，只是把那里的一列扩充为并排的几列。

这一点可用于验证矩阵乘法的一条重要性质。假定给了三个矩阵A，B，C，不一定是方阵。又假定这三个矩阵可以按A，B，C的次序相乘，也即A，B的列数分别等于B，C的行数。这一条重要性质是：

1B 矩阵乘法满足结合律：$(AB)C=A(BC)$

如果C是一个向量，换句话说，如果C是一个只有一列的矩阵，那么这条性质就等价于性质(7)。性质(7)是矩阵乘法规则的基础，如果C有n列C_1，…，C_n，那么我们就只需利用性质(7)n次。一方面$(AB)C$的第一列是$(AB)C_1$；另一方面BC的第一列是BC_1，从而$A(BC)$的第一列是$A(BC_1)$。由(7)知$(AB)C_1=A(BC_1)$。同理其它各列也都满足这一关系。

练习1.3.9 试对下面的A，B，C验证结合律

$$A=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\1&0&1\end{bmatrix},\quad B=\begin{bmatrix}1&0&0\\-2&1&0\\0&0&1\end{bmatrix},$$

$$C=\begin{bmatrix}2&1&1\\4&1&0\\-2&2&1\end{bmatrix}.$$

下面我们要讨论Gauss消去法与矩阵乘法的关系。但还有两条性质要提一提，一条是矩阵乘法满足的，另一条是不满足的。满足的一条是

1C 矩阵乘法满足分配律

$$A(B+C)=AB+AC,\quad (B+C)D=BD+CD$$

当然，这里B，C的形状必须一样，以保证它们可以相加；A，D的形状必须合乎这里左乘和右乘的要求。这一规律的证明叙述起来太麻烦。

矩阵乘法不满足的一条是

1D 矩阵乘法不满足交换律，即一般情况下$FE\neq EF$。

例 假定E是我们前面所述的矩阵，它的作用是从第二个方程中减去第一个的两倍

$$E=\begin{bmatrix}1&0&0\\-2&1&0\\0&0&1\end{bmatrix}.$$

又假定F是在同一个方程组的消去法中最后一步要用到的矩阵。它的作用是从第三个方程中减去第二个的-3倍（或把第二个方程的3倍加到第三个上去）。

$$F=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&3&1\end{bmatrix}.$$

那么我们将

$$FE=\begin{bmatrix}1&0&0\\-2&1&0\\-6&3&1\end{bmatrix}\quad 与\quad EF=\begin{bmatrix}1&0&0\\-2&1&0\\0&3&1\end{bmatrix}$$

比较一下，显然，次序不同，得到的积也不同。前一情况下，作用于方程组的次序是E先F后，作用是先从第二个方程中减去第一个的两倍，再把第二个的三倍加到第一个上去，因而（3.1）处是-6。这是消去法的实际作法。后一情况下，作用于方程组的次序是F先E后。此时第三个方程不受第一个的影响，（3.1）处不是-6，是0。因此$FE\neq EF$。

单位矩阵

有一个重要的$n\times n$矩阵，它与任何$n\times n$矩阵相乘时都是可交换的。事实上，任何$n\times n$矩阵乘上它都不变，它的作用相当于1。称具有这一性质的矩阵为单位矩阵。单位矩阵主对角线上的元素都为1，主对角线以外的元素都为零。记单位矩阵为I，$n=4$时

$$I=\begin{bmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{bmatrix}.$$

易于验证，对任何同阶的矩阵A都有$IA=AI$。

练习1.3.10 试证，如果$A=\begin{bmatrix}a&b\\c&d\end{bmatrix}$与矩阵

$$B=\begin{bmatrix}1&0\\0&0\end{bmatrix} \quad 和 \quad C=\begin{bmatrix}0&1\\0&0\end{bmatrix}$$

相乘时都可交换，则A必为单位矩阵的倍数，即$a=d$，$b=c=0$。再证这样的A与任何2×2矩阵相乘时都是可交换的，也即只有这样的矩阵才具有这种性质。

练习1.3.11 试举出具有下列性质的2×2矩阵

(a) $A^2=-I$，A的元素都是实数；

(b) $B^2=0$，$B\neq0$；

(c) $CD=-DC$，$CD\neq0$；

(d) $EF=0$，E，F的元素全都不为零。

练习1.3.12 问下列命题成立否，不成立的请举例。

(a) 如果B的一、三两列相同，则AB的一、三两列也相同。

(b) 如果B的一、三两行相同，则AB的一、三两行也相同。

(c) 如果A的一、三两行相同，则AB的一、三两行也相同。

(d) $(AB)^2=A^2B^2$。

练习1.3.13 AB的第一行是B的所有行的线性组合，问这一线性组合的权是什么，试对下面的A，B写出AB的第一行

$$A=\begin{bmatrix}2&1&4\\0&-1&1\end{bmatrix}, \quad B=\begin{bmatrix}1&1\\0&1\\1&0\end{bmatrix}.$$

§1.4 Gauss消去法等价于分解为三角矩阵

现在我们从矩阵的角度来看看 Gauss 消去法相当于怎样一回事。我们还是从方程组$\boldsymbol{A}x=b$：

$$\boldsymbol{A}x=\begin{bmatrix}2 & 1 & 1\\ 4 & 1 & 0\\ -2 & -2 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}u\\ v\\ w\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1\\ -2\\ 7\end{bmatrix}.$$

讨论起，对于该方程组消去法的三步是

(i)从第二个方程减去第一个的2倍；

(ii)从第三个方程减去第一个的－1倍；

(iii)从第三个方程减去第二个的－3倍。

三步之后得到一个等价的但简化了的方程组。记新的系数矩阵为$\boldsymbol{U}$，则

$$\boldsymbol{U}x=\begin{bmatrix}2 & 1 & 1\\ 0 & -1 & -2\\ 0 & 0 & -4\end{bmatrix}\begin{bmatrix}u\\ v\\ w\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1\\ -4\\ -4\end{bmatrix}. \qquad (9)$$

新的系数矩阵中主对角线下面的元素全都零，称这种矩阵为上三角矩阵。

右端的新向量c，是b经过了变A为U的步骤之后的结果。这样Gauss消去法可归结为

从A和b开始；

依次经过步骤(i)，(ii)，(iii)；

最终得到U和c。

接下去是用反向代入法求出$Ux=c$的解。暂且不管这解，先讨论A与U之间的关系。

前一节我们引进了矩阵E，作用相当于步骤(i)，也即相当于从第二行减去第一行的2倍。现在我们记E为E_{21}，下标表示用第一行去改变第二行，也表示把系数矩阵中(2.1)处的元素变为零。

也即消去法步骤(i)(从第二行减去第一行的倍数为2)可以用乘上矩阵

$$E_{21}=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\-2 & 1 & 0\\0 & 0 & 1\end{bmatrix}$$

来实现。类似地我们得到步骤(ii),(iii)可以用乘上矩阵

$$E_{31}=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\0 & 1 & 0\\1 & 0 & 1\end{bmatrix},\quad E_{32}=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\0 & 1 & 0\\0 & 3 & 1\end{bmatrix}$$

来实现。我们称这三个矩阵为基本矩阵。基本矩阵的作用是容易看出来的。要E_{ij}起到从第i个方程中减去第j个方程的l_{ij}倍的作用,我们这样来构造它:写出适当阶数的单位矩阵I,把I中第i行第j列处的元素零换为$-l_{ij}$,得到的就是E_{ij}。注意,基本矩阵都是下三角矩阵,且其主对角线上的元素全都为1。

三次矩阵运算把A变成了U,因而

$$E_{32}E_{31}E_{21}A=U \tag{10}$$

由于对非齐次项也进行了同样的运算,因而

$$E_{32}E_{31}E_{21}b=c。 \tag{11}$$

我们可以求出三个基本矩阵的积,得到变A,b为U,c的单个矩阵

$$E_{32}E_{31}E_{21}=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\-2 & 1 & 0\\-5 & 3 & 1\end{bmatrix}. \tag{12}$$

求得的这个积也是一个下三角矩阵。这个矩阵在练习1.3.6中见过。根据结合律,可以先求出三个E的积,用得到的积直接与A相乘。结果跟依次用E去乘一样。我们指出,积中左下角的-5在消去过程中不曾出现过。它是(i),(ii),(iii)的综合产物。(i),(iii)使它为-6,(ii)给它加上1,最后成了-5。

我们提出一个重要问题:从U怎样回到A?也即经过了高斯消去法的方程怎样还原?

Gauss消去法单个的一步是不难还原的。比如，从第二个方程减去第一个方程2倍的(i)要还原它的作用，只需把第一个的2倍加到第二个上去就行了（不是第二个的2倍加到第一个上去！）这样，基本矩阵E_{21}的作用就可以由基本矩阵E_{21}^{-1}给还原。把E_{21}中的-2换为2就是E_{21}^{-1}

$$E_{21}^{-1}=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 2 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}.$$

E_{21}与E_{21}^{-1}（次序不拘）的积为单位矩阵。用矩阵的话说，E_{21}与E_{21}^{-1}互为逆矩阵。

$$E_{21}^{-1}E_{2}=I,\quad E_{21}E_{21}^{-1}=I \tag{13}$$

类似地，(ii)，(iii)中的基本矩阵的作用也可以用把减掉的再加回去的办法还原：

$$E_{31}^{-1}=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ -1 & 0 & 0\end{bmatrix},\quad E_{32}^{-1}=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & -3 & 1\end{bmatrix}.$$

将消去法每一步，也即分别将(i)，(ii)(iii)的作用还原的矩阵，我们都有了。进一步要问，怎样一次把整个消去过程还原，也就是用一个什么样的矩阵能直接把U变回为A。我们指出，(iii)是变A为U的最后一步，还原变U为A时应最先还原这一步，第二步是把(ii)的作用还原，最后一步才是把(i)的作用还原（这是一条一般的规律：将依次进行的若干次运算还原时，应按相反的次序进行。我们称这种还原次序为后进先出，关于这一次序，下一节讲逆矩阵时还要讲到）。这还原过程用矩阵写出来就是

$$A=E_{21}^{-1}E_{31}^{-1}E_{32}^{-1}U. \tag{14}$$

将$U=E_{32}E_{31}E_{21}A$代入(14)，由于所有$E_{32}^{-1}E_{32}$样子的积都是单位矩阵，我们看到按(14)中的次序安排E_{32}^{-1}，E_{31}^{-1}，E_{21}^{-1}，确实把U变回为A。

现在我们来求变U为A的矩阵L。L应该是(14)中三个矩阵的

积

$$L=E_{21}^{-1}E_{31}^{-1}E_{32}^{-1}，因而 A=LU。\tag{15}$$

也即应先求出消去法每一步的逆矩阵，L就是这些逆矩阵的积。矩阵L与变A为U的矩阵$E_{32}E_{31}E_{21}$互为逆矩阵。

$$L=(E_{32}E_{31}E_{21})^{-1}，L^{-1}=E_{32}E_{31}E_{21}。\tag{16}$$

计算L的公式我们有了，但是关于L的最重要的事实，须把L实际地算出来才能看到。

$$L=\begin{bmatrix}1&0&0\\2&1&0\\0&0&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\-1&0&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&-3&1\end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix}1&0&0\\2&1&0\\-1&-3&1\end{bmatrix}。\tag{17}$$

当然，L是主对角元素都为1的下三角矩阵，突出的一点是，主对角线下面的元素恰恰是消去过程中三步所用的倍数2，−1，−3。一般情况下，三个矩阵相乘，不可能根据因子矩阵的元素能写出乘积矩阵。但这里的三个矩阵可以，它们按规定的次序相乘时，能立即写出答案。可见，倍数l_{ij}（从第i行减去第j行的l_{ij}倍，使（i，j）处的元素为零）也是变U为A的矩阵L的元素。提醒一句，L也变c为b：$Lc=b$。

强调一句，l_{ij}与(12)中的乘积$E_{32}E_{31}E_{21}$之间没有这种关系。该乘积（3.1）处的元素为−5。

练习1.4.1 试用L乘（12）中的矩阵，以验证它是L的逆矩阵L^{-1}。注意，能够直接写出的是L，不是L^{-1}。

得到的矩阵L的后进先出次序，对任何阶数的矩阵都适用。每一步所减去的倍数也都是毫无改变地出现在L的相应位置上。我们考虑4×4矩阵，此时

$$L=E_{21}^{-1}E_{31}^{-1}E_{41}^{-1}E_{32}^{-1}E_{42}^{-1}E_{43}^{-1}I。$$

为方便起见，在右端末尾加上单位矩阵I。这完全不影响乘积L，但

却使我们可以把运算的作用想象成为加在单位矩阵的行上。第一步运算是E_{43}^{-1}。它把第三行(0, 0, 1, 0)的l_{43}倍加到第四行上去，使l_{43}站到L中它所应处的位置上。接下去E_{42}^{-1}，E_{32}^{-1}把第二行(0, 1, 0, 0)的倍数加回到第三、第四行上去，使l_{42}，l_{32}站到了它们在L中所应处的位置上，且完全不影响l_{43}。最后是运算E_{41}^{-1}、E_{31}^{-1}，E_{21}^{-1}，给L的第一列填上元素。

将上三角方程组$Ux=c$还原为$Ax=b$的也是这些运算，次序也相同。这些运算是把为得到U而减了去的倍数加回去。由于这些运算的总和相当于乘以L，因而Gauss消去法的矩阵形式可以概括为

1E 只要主元素都不为零，矩阵A就可以写成下三角矩阵L与上三角矩阵U的乘积LU。L主对角线上的元素全为1，主对角线下(i, j)处的元素是消去过程中从第i行减去第j行的倍数l_{ij}。U是消去过程完成之后反向代入之前的系数矩阵。它的主对角线上的元素是主元素。

例

$$A=\begin{bmatrix}1 & 2\\ 3 & 4\end{bmatrix}\text{变为}U=\begin{bmatrix}1 & 2\\ 0 & -2\end{bmatrix},\quad L=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 3 & 1\end{bmatrix}.$$

练习1.4.2 试用消去法求下列两个A的L和U

$$A=\begin{bmatrix}2 & 1\\ 8 & 7\end{bmatrix},\quad A=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 8 & 1\end{bmatrix}.$$

练习1.4.3 试将下列方程组中的A分解为LU，并写出消去过程之后的上三角方程组$Ux=c$。

$$Ax=\begin{bmatrix}2 & 3 & 3\\ 0 & 5 & 7\\ 6 & 9 & 8\end{bmatrix}\begin{bmatrix}u\\ v\\ w\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2\\ 2\\ 5\end{bmatrix}.$$

消去法是先将原方程组$Ax=b$(或$LUx=b$)变为$Ux=c$。用矩阵的话来说，就是乘上了L^{-1}，因而$c=L^{-1}b$(实际计算时我们不去求L^{-1}。正向消去是一步一步完成的，到L^{-1}的因子全部出现时，正向消去已经完成了)。再用反向代入法求出上三角方程组$Ux=c$的

解。代入过程是，由上三角方程组最后一个方程得$x_n=c_n/u_{nn}$，将它代入倒数第二个方程得x_{n-1}，类推。表示成矩阵，则方程组的解为

$$x=U^{-1}c，或x=U^{-1}L^{-1}b，或x=A^{-1}b \tag{18}$$

矩阵U^{-1}也是我们不去计算的。计算U^{-1}求x太费时间。仅是U^{-1}乘c的计算次数就已经与反向代入的计算次数一样，为$n^2/2$，还得另外加上求U^{-1}的运算。类似的说明也适用于A^{-1}，我们要的是解$x=A^{-1}b$，不是A^{-1}的元素。

方程组左端不变右端换一个新向量b'（设计问题中常常遇到同一个系数矩阵，具有许多个不同的右端向量，就是这种情形），这时我们可以不重复整个消去过程。对新向量b'可以省掉求U的$n^3/3$次运算，因为U已经有了，只须把计算机内存着的消去步骤应用于新向量b'就可以了。

总之，有了因子L和U，那么对新的右端b'只须n^2次运算就可以了。$n^2/2$次用于正向消去以求c'，$n^2/2$次用于反向代入以求x'。

例 在我们所讨论过的一个方程组中矩阵A的LU分解式为

$$A=\begin{bmatrix}2&1&1\\4&1&0\\-2&2&1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1&0&0\\2&1&0\\-1&-3&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}2&1&1\\0&-1&-2\\0&0&-4\end{bmatrix}=LU$$

U和L分别是从(9)和(17)抄来的。假定A不变，而给了我们新的右端b'，例如

$$\begin{aligned}2u'+v'+w'&=8\\4u'+v'\quad\quad&=11\\-2u'+2v'+w'&=3\,.\end{aligned} \tag{19}$$

利用已知的L和U，先从$Lc'=b'$，也即从

$$\begin{bmatrix}1&0&0\\2&1&0\\-1&-3&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}c_1'\\c_2'\\c_3'\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}8\\11\\3\end{bmatrix}得到c'=\begin{bmatrix}8\\-5\\-4\end{bmatrix}.$$

这就是(19)式经过正向消去之后的右端；完成了正向消去，剩下的

就是对$Ux'=c'$，也即对

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 0 & -1 & -2 \\ 0 & 0 & -4 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u' \\ v' \\ w' \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 8 \\ -5 \\ -4 \end{bmatrix}$$

应用反向代入就可得到解答，得到的解答为

$$x'=\begin{bmatrix} 2 \\ 3 \\ 1 \end{bmatrix}$$

可见，将A分解为LU之后，问题就成了解两个三角方程组。只需应用正向代入和反向代入就可得到解答。

对这两个三角因子我们再作两点说明：

(1) LU的形状在一个方面“不对称”：U的主对角线上是主元素，而L的主对角线上全是1。我们可以对U加以改造，使得A的三角分解在这方面对称。方法是从U中分出一个由主元素d_1，d_2，…，d_n构成的对角矩阵D，使

$$U=\begin{bmatrix} d_1 & & & \\ & d_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & d_n \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & u_{12}/d_1 & u_{13}/d_1 & \cdot \\ & 1 & u_{23}/d_2 & \cdot \\ & & \cdot & \cdot \\ & & & 1 \end{bmatrix}$$

这样A的三角分解就成了$A=LDU$：L是下三角矩阵，U是上三角矩阵。L和U的主对角线元素都全为1，D是主元素构成的对角矩阵（虽然有时会引起混淆，为方便起见，我们还是把新的上三角矩阵也记为U）。分解式$A=LDU$中L和U的地位是同等的。

把例子中的U如法炮制一下就成了

$$A=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ -1 & -3 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 0 & -1 & -2 \\ 0 & 0 & -4 \end{bmatrix}$$

$$
=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ -1 & -3 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 2 & & \\ & -1 & \\ & & -4 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}
$$

$$
=LDU.
$$

（2）可能给读者造成了一种印象，正向消去的步骤是固定的，没有改动余地的。不对的，是有改动余地的。有一个“Crout算法”，它安排的步骤就略有不同。当然，没有完全的自由，否则后面的运算会破坏前面运算已经形成了的零。但最后得到的L，D和U是一样的。这正是我们要讲的主要的一点：

1F 如果$A=L_1D_1U_1$，$A=L_2D_2U_2$，其中L都是对角线上元素为1的下三角矩阵，U都是对角线上元素为1的上三角矩阵，D都是对角元素全都不为零的对角矩阵，则$L_1=L_2$，$D_1=D_2$，$U_1=U_2$。也即A的分解式LDU唯一。

证明 知$L_1D_1U_1=L_2D_2U_2$。我们要用到L_1^{-1}与L_1所具有的一些共同点：都为下三角矩阵，对角线上元素都全为1，都是基本矩阵的乘积等。类似地，也存在一个对角元素全为1的上三角矩阵U_2^{-1}，使得$U_2U_2^{-1}=I$。显然，状如D_1的任何一个对角矩阵都有逆矩阵，且逆矩阵也是对角的：

$$
\begin{bmatrix} d_1 & & & \\ & d_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & d_n \end{bmatrix}^{-1}=\begin{bmatrix} 1/d_1 & & & \\ & 1/d_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1/d_n \end{bmatrix}.
$$

左乘以L_1^{-1}和D_1^{-1}，右乘以U_2^{-1}，方程就成了

$$
U_1U_2^{-1}=D_1^{-1}L_1^{-1}L_2D_2.
$$

左端是对角线上都全为1的两个上三角矩阵，它们的积也必定是同样类型的矩阵。而右端是一个下三角矩阵。一个对角元素全为1的上三角矩阵与一个下三角矩阵相等，这只在它们同为单位矩阵时才有可能。由此我们得到$U_1U_2^{-1}=I$。两边右乘U_2得$U_1=U_2$。

类似地我们可以得到$L_1=L_2$，$D_1=D_2$。

练习1.4.4 假定主元素都不为零，试求出一般2×2矩阵$A=\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$的分解式$LDU$。

练习1.4.5 已知

$$A=\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix},\quad b=\begin{bmatrix} 6 \\ 0 \\ -6 \end{bmatrix}.$$

试先求出因子L，D，U，再求出中间向量c，最后求出$Ax=b$的解。

练习1.4.6 系数矩阵A相同的两个$n=150$阶方程组。解第二个所用的计算机时间是第一个的$\frac{1}{50}$。为什么？

练习1.4.7 试求出$Ax=b$的解。已知

$$L=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 \end{bmatrix},\quad U=\begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},\quad b=\begin{bmatrix} 2 \\ 3 \\ 4 \end{bmatrix}.$$

正向消去为$Lc=b$，反向代入为$Ux=c$。

§1.5 行交换，逆矩阵和舍入误差

主元素为零的问题我们一直回避着，其实这是消去法第一步就可能遇到的。也即左上角的元素a_{11}就可能为零，从而消去法第一步就无法进行。例如，对

$$\begin{bmatrix} 0 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} \tag{20}$$

消去法第一步就是无法进行的。理由显然，用第一个方程的倍数，无论如何消不掉系数3。

这里问题解决起来很简单，将两个方程对换一下位置，那么主元素就是换到左上角来的3，不是零了。在这一简单情况下，经过行

交换的矩阵已经是上三角矩阵，它本身就是U。它的下三角矩阵L是单位矩阵I。方程组

$$3u+4v=b_2$$
$$2v=b_1$$

直接就可以用反向代入法求解。

行的位置的交换可以用矩阵表示出来。置换矩阵

$$P=\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

与例子中的A相乘就使两行交换

$$PA=\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 3 & 4 \\ 2 & 0 \end{bmatrix}.$$

当然P与b相乘也使b_1，b_2交换位置。

考虑一般情形，假定为零的主元素是在进行了若干步之后才出现（第二章第四节公式(21)是我们将推导出来的主元素公式。但是计算那个公式本身最好的方法是消去法，因而判别主元素是否为零的方法还是消去法）。例如，可以假定前$k-1$个主元素都不为零，第k个主元素为零。下面对这种情况进行讨论。

这种情况下有两种可能，一种是消去法可以继续进行，一种是不能继续进行。从后面的方程中能找到一个方程，让它跟第k个方程交换位置，第k个主元素就不为零了，这种情况下消去法可以继续进行。若从后面的方程中找不到这样的方程，那么消去法就不能继续进行。换句话说，第k列中零主元素正下方的元素中，如果有不为零的，譬如说在第l行，那么将k，l两行交换，消去法就可以继续进行，如果第k列中零主元素正下方的元素全为零，那么消去法就不能继续进行。此时以零主元素为左上角元素的这个子矩阵中有一列全为零，这样的矩阵是奇异的，而且这决定了矩阵A也是奇异的。消去法指出了矩阵的奇异性，看一下我们的方程组，从第k个方程开始以下的部分中，未知数的个数少于方程的个数。事实上，是要我们解方程个数多于未知数个数的方程组。这是下一章要

讨论的情形。这种情形下，方程组或者有无穷多解，或者无解。

我们指出，仅仅最后一个主元素为零，其它的主元素都不为零，这时的系数矩阵也是奇异的，因为第 n 个元素下面没有元素，当然也就找不到非零的。

消去法可以进行的例子（非奇异情况）：

$$\begin{bmatrix} 1 & 3 & 2 \\ 2 & 6 & 9 \\ 2 & 8 & 8 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 3 & 2 \\ 0 & 0 & 5 \\ 0 & 2 & 4 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 3 & 2 \\ 0 & 2 & 4 \\ 0 & 0 & 5 \end{bmatrix}$$

消去法不能继续进行的例子（奇异情况）：

$$\begin{bmatrix} 1 & 3 & 2 \\ 2 & 6 & 9 \\ 3 & 9 & 8 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 3 & 2 \\ 0 & 0 & 5 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}.$$

练习1.5.1 解下面的方程组，需要的话进行行交换

$$\begin{aligned} u+4v+2w&=-2 \\ -2u-8v+3w&=32 \\ v+w&=1. \end{aligned}$$

练习1.5.2 试对奇异方程组

$$\begin{aligned} u+v&=b_1 \\ 3u+3v&=b_2 \end{aligned}$$

进行消去。问b_1，b_2有怎样的关系时，该方程组有解。

本节我们限于讨论非奇异情况，也即限于讨论通过行交换能够找到非零主元素的情况。（当然后面的主元素可以再为零，我们就要再做行交换。甚至可以重复几次，虽然这种情况不多见，但是有这种可能。我们指出，计算机上进行行交换不费什么时间，只是查看一下而已）。我们要问，行交换给因式LU（或LDU)带来怎样的变化。

当然，与前面一样我们只进行到求出U为止。这是正向消去的目的。但现在正向消去所包括的，不光是从一行减去另一行倍数的矩阵 E_{ij}，还包括置换矩阵 P_{kl}。用P_{kl}乘另一个矩阵，使得另一个

矩阵k，l两行互换位置（P_{kl}可以用一个巧妙的方法求得。我们用它乘单位矩阵I，则$P_{kl}I=P_{kl}$。由此可见P_{kl}是k行与l行互换了的单位矩阵）。例如

$$P_{24}=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\0 & 0 & 0 & 1\\0 & 0 & 1 & 0\\0 & 1 & 0 & 0\end{bmatrix}.$$

逆矩阵P_{kl}^{-1}的求法也同样简单。P_{kl}^{-1}使P_{kl}还原，也就是说，它使P_{kl}的k，l两行交换位置，因而$P_{kl}^{-1}=P_{kl}$。

我们来考察一下行交换时变U为A的矩阵。它的计算与前相同，只是它的因子中不仅包含E_{kl}^{-1}，而且包含P_{kl}^{-1}。因而，把U变回为A的矩阵不再是下三角矩阵L。也即，如果遇到了零主元素，并经过了行交换，那么矩阵A就不能分解为对角元素不为零的三角矩阵L与U的积。

不过经过简单的处理，我们就几乎可以得到$A=LU$。把消去过程中需作的行交换都列出来，并在进行消去之前把这些行交换一次完成。也即先变A为PA再进行消去法，P也是置换矩阵，它的每一行每一列上都只有一个1。事实上，P是全体基本置换矩阵P_{kl}的乘积，也即由一个矩阵P一次完成了所有的行交换。

这样，就可以对PA进行消去而不会遇到零主元素。此时的主元素与消去过程中每遇到一个零主元素进行一次行交换所得到的主元素是一样的。矩阵PA可以分解为主元素不为零的三角矩阵的积LU（或LDU）。用P把所有的行交换一次完成，这样做仅有一点影响，假定从第二行中减去第一行的倍数之后，为得到非零主元素将二、三两行交换，那么，对于PA来说，由于事先二、三两行已经交换，因而就是从第三行中减去第一行的倍数。

例 不先做行交换，则步骤为

$$A=\begin{bmatrix}1 & 2 & 3\\2 & 4 & 2\\0 & 1 & 1\end{bmatrix}\xrightarrow{E_{21}}\begin{bmatrix}1 & 2 & 3\\0 & 0 & -4\\0 & 1 & 1\end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow{P_{23}}\begin{bmatrix}1 & 2 & 3\\0 & 1 & 1\\0 & 0 & -4\end{bmatrix}=U.$$

先做行交换，则$P=P_{23}$

$$PA=\begin{bmatrix}1 & 2 & 3\\0 & 1 & 1\\2 & 4 & 2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\0 & 1 & 0\\2 & 0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 2 & 3\\0 & 1 & 1\\0 & 0 & -4\end{bmatrix}=LU.$$

从第三行减去了第一行的 2 倍，也即把E_{21}换成了E_{31}，且PA可由L还原。

本章重点的高斯消去法，其整个理论可归纳为

1G 在非奇异的情况下，有置换矩阵P存在，使得PA可以分解为$PA=LU$（或$PA=LDU$），且主元素不为零。此时$Ax=b$有唯一解，可用消去法并经过行交换求得此解。在奇异情况下，行交换也排除不了零主元素。

练习1.5.3 试对下面的A求PA的分解式$PA=LDU$

$$A=\begin{bmatrix}0 & 1\\2 & 3\end{bmatrix}.$$

练习1.5.4 设

$$A=\begin{bmatrix}1 & 1 & 1\\1 & 1 & 2\\1 & 2 & 5\end{bmatrix},$$

试求出使PA可以分解为LDU的P。

练习1.5.5 试问下列方程组是奇异的还是非奇异的，是否有解：

$$\begin{aligned}v-w&=2 \qquad & v-w&=0\\u-v&=2 \qquad & u-v&=0\\u-w&=2 \qquad & u-w&=0\end{aligned}$$

逆矩阵

奇异情况的基本理论要到§2.4时才能都讲到。非奇异情况（是用主元素全都非零来标志的）也需独立于消去法来进行讨论。我们已经用过符号E_{ij}^{-1}，U^{-1}和A^{-1}。这种符号适于用来表述逆矩阵的某些基本性质。

逆矩阵的第一条基本性质是，如果A的“左逆”B和“右逆”C都存在，则必相等。

1H　若$BA=I$，$AC=I$，则$B=C$

证明　由矩阵乘法可结合，知$B(AC)=(BA)C$，由所给条件，得$BI=IC$，也即$B=C$。长方形矩阵的左逆和右逆可以一个存在一个不存在。方阵则不，方阵的左逆和右逆的存在与否是同时的。非奇异$n\times n$矩阵A的左逆和右逆都存在，也即有A^{-1}存在，使

$$AA^{-1}=A^{-1}A=I$$

这一性质可用基本矩阵E_{ij}和它们的逆来证明。L^{-1}是根据乘积的逆矩阵规则构成的。

1I　如果A，B都可逆，则AB可逆，且AB的逆等于B的逆乘上A的逆

$$(AB)^{-1}=B^{-1}A^{-1}. \tag{21}$$

证明　结合律使得可以去掉括号得

$$(AB)(B^{-1}A^{-1})=ABB^{-1}A^{-1}=AIA^{-1}=AA^{-1}=I.$$

$$(B^{-1}A^{-1})(AB)=B^{-1}A^{-1}AB=B^{-1}IB=B^{-1}B=I.$$

推广这一规则到三个矩阵的乘积，得到$A=LDU$的逆为$A^{-1}=U^{-1}D^{-1}L^{-1}$，这一结果我们见过。很少有必要对逆矩阵进行计算。用计算A^{-1}来得到$A^{-1}b$，那是消费时间的笨法子。但是考察一个逆矩阵如何计算和所需运算次数，这是很有意思的，一种计算方法是每次考虑$AA^{-1}=I$的一列。如果x_j是A^{-1}的第j列，e_j是单位矩阵的第j列，那么显然有$Ax_j=e_j$。这样我们就得到了有n个不同右端e_1，…，e_n的n个方程组。由于这n个方程组的系数矩阵都是

A，所以只需对A进行一次消去。最简单的方案是 Gauss-Jordan（高斯-约当）法：对这n个方程组同时进行消去。

例

$$\begin{bmatrix} A & e_1 & e_2 & e_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 4 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ -2 & 2 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\rightarrow \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & -2 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 3 & 2 & 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\rightarrow \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & -2 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -4 & -5 & 3 & 1 \end{bmatrix}.$$

这就完成了正向消去。最后一个矩阵中，前三列是我们熟悉的矩阵U，后三列是经过了正向消去的三个右端。因而可以进行反向代入了。后三列实际上是基本运算E_{21}，E_{31}，E_{32}对单位矩阵作用的结果，$L^{-1}=E_{32}E_{31}E_{21}$。反向代入得到三个方程组的解$x_1$，$x_2$，$x_3$就是逆 矩 阵$A^{-1}$的三列。高斯-约当法同时求出逆矩阵的各列。做法是接着Gauss消去法做下去，再消去主元素上面的元素，即从主元素上面的行中减去主元素所在行的倍数，使主元素上面的元素也变为零。第一个被消去的是第二列中主元素上面的元素。

$$[A \quad I] \rightarrow \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & -2 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -4 & -5 & 3 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\rightarrow \begin{bmatrix} 2 & 0 & -1 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & -2 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -4 & -5 & 3 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\rightarrow \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & -\frac{1}{4} \\ 0 & -1 & 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & -4 & -5 & 3 & 1 \end{bmatrix}$$

$$
\rightarrow\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \frac{1}{8} & \frac{1}{8} & -\frac{1}{8} \\ 0 & 1 & 0 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 1 & \frac{5}{4} & -\frac{3}{4} & -\frac{1}{4} \end{bmatrix}
$$

$$
=[I \quad A^{-1}]
$$

最后一步是用各主元素除所在行的每一个元素。现在左半的系数矩阵化成了单位矩阵。我们要解的三个方程组化成了

$$
Ix_1=\begin{bmatrix} \frac{1}{8} \\ -\frac{1}{2} \\ \frac{5}{4} \end{bmatrix}, Ix_2=\begin{bmatrix} \frac{1}{8} \\ \frac{1}{2} \\ -\frac{3}{4} \end{bmatrix}, Ix_3=\begin{bmatrix} -\frac{1}{8} \\ \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{4} \end{bmatrix}. \tag{22}
$$

这就是A^{-1}的三列。Gauss-Jordan法包含对A的正反向两个消去，使得主元素上下方的元素都变为零，同时对单位矩阵的各列也进行同样的运算。结果是，在3×6矩阵中左半的A变成了I，右半的I变成了A^{-1}。

注　出于纯理论上的探讨，我们来计算一下求A^{-1}所需的运算次数。一般情况下，对每一个右端所需的运算次数为n^2，正向消去反向代入各$n^2/2$。n个右端共需n^3次。再加上对A本身所进行的$n^3/3$，得总运算次数为$4n^3/3$。

这一结果是对一般情况求得的，现在我们针对右端e_j的特殊形式进行讨论。在计算的前半，正向消去过程中，对e_j所在列，只需改变1下面的元素，e_1所在列需要$n^2/2$次，但e_j所在列需$(n-j+1)^2/2$次（消去法进行到j列之前涉及不到e_j，进行到第j列时只剩下$(n-j+1)$个分量了）。换句话说，变I为L^{-1}的过程只需对一个下三角矩阵进行工作，对角线上方的元素为零，计算量为

$$
\frac{n^2}{2}+\cdots+\frac{(n-j+1)^2}{2}+\cdots+\frac{1}{2}\approx\frac{n^3}{6}. \tag{23}
$$

加上对A所进行的$n^3/3$次，再加上反向代入求x_j所需的$n(n^2/2)$次（按Gauss法分别求，按高斯-约当法同时求，这个数是一样的）得求A^{-1}所需总运算次数为

$$\frac{n^3}{6}+\frac{n^3}{3}+n\left(\frac{n^2}{2}\right)=n^3.$$

这有明显的降低。只相当于求A^2的运算次数（求A^3的运算量是求A^2的两倍）。然而不需要A^{-1}时，我们不进行计算。

练习1.5.6 试写出$AB^{-1}C$的逆矩阵。

练习1.5.7 试求A，B的逆矩阵

$$A=\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix},\quad B=\begin{bmatrix}\cos\theta & -\sin\theta\\ \sin\theta & \cos\theta\end{bmatrix}.$$

练习1.5.8 试用求解

$$\begin{bmatrix}1 & 1\\ 3 & 3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a & b\\ c & d\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}$$

来证明 $\begin{bmatrix}1 & 1\\ 3 & 3\end{bmatrix}$没有逆矩阵。

练习1.5.9 试描述E乘A的作用，并写出E^{-1}。

$$E=\begin{bmatrix}1 & 0 & 8\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}$$

练习1.5.10 试用高斯-约当法，即用同时求解$Ax_j=e_j$的方法求下面两个A的逆矩阵

$$A=\begin{bmatrix}a & b\\ c & d\end{bmatrix},\quad A=\begin{bmatrix}2 & -1 & 0\\ -1 & 2 & -1\\ 0 & -1 & 2\end{bmatrix}.$$

舍入误差

理论上非奇异情况已经没有什么问题，为使主元素不为零，要做行交换。在非奇异情况下用行交换必定找得到非零主元素，从而就可以用反向代入求出$Ax=b$的解。实践中，为避免求得的解无意义，有时也需进行交换。

实际问题中100×100的方程不算大，对它进行正向消去所需的运算次数，就已经高于30万次，每一次运算都会有舍入误差。在一

般的浮点运算中，通常是把数 n 表示成 $n = m10^c$，m 是小数，$\frac{1}{10} \leqslant |m| < 1$，$c$ 是指数，m 所含数字的个数等于计算机的字长。不必具有浮点运算误差分析的任何知识，我们就可以指出，指数 c 差 2 的两个浮点数相加就需要进行舍入

$$.345 + .00123 \rightarrow .346$$

问题是这每一步的舍入误差累积起来对解的总影响有多大？

这是个很不易解决的问题，由于计算机的出现，百万次运算立刻成为可能。那时，杰出的数学家von Neumann钻研过这个问题。他利用Gauss的成果得到了一个美妙的消去算法，然而他估计误差的方法却很复杂。Wilkinson找到了估计舍入误差的方法。他的书现在也还是人们引用的经典著作。

$$A = \begin{bmatrix} 1. & 1. \\ 1. & 1.0001 \end{bmatrix} \text{与} A' = \begin{bmatrix} .0001 & 1. \\ 1. & 1. \end{bmatrix}$$

分别取自Noble所写与Forsythe和Moler所写的教科书。我们用这两个简单矩阵作例子来解释关于舍入误差的三个要点。

第一点是

1) 我们把对舍入误差极为敏感的矩阵称为病态矩阵，把对舍入误差不敏感的矩阵称为正常矩阵。A 是一个病态矩阵，A' 是一个正常矩阵。

对正常矩阵，A' 或右端向量 b 的元素的微小变化，对方程组 $A'x = b$ 的解的影响也是微小的。对病态矩阵则不然，我们考虑系数矩阵都为 A 且右端极为接近的两个方程组

$$\begin{aligned} u + \quad v &= 2 \\ u + 1.0001v &= 2.0001; \end{aligned} \qquad \begin{aligned} u + v &= 2 \\ u + 1.0001v &= 2.0002。\end{aligned}$$

前一个的解是 $u = 1$，$v = 1$，后一个的解是 $u = 0$，$v = 2$。b 的万分位上的改变使得解的个位改变，也即 b 的改变在解中扩大了一万倍。不同的计算方法可以使病态改变位置，但去不掉病态。真解对误差敏感，则数值计算得到的解就更加敏感。

第二点是

1K 坏算法会把正常矩阵变为病态的。

很可惜，对矩阵A'来说，我们不得不把正向Gauss消去称为坏算法。假定我们取.0001作第一个主元素。从第二行减去第一行的10000倍，得右下角的元素为 -9999 。舍入成字长为三的数字成为-10000。右下角原来的元素1完全不起作用了。

考虑一个特殊的例子

$$\begin{aligned} .0001u+v&=1 \\ u+v&=2 \end{aligned} \tag{24}$$

正向消去之后，第二个方程成为

$$-9999v=-9998 \text{或} v=.99990$$

舍入得$-10,000v=-10,000$或$v=1$。到现在为止，第二个方程的危害还没有得到反映。$v=.99990$有三位数字是准确的，将它代入到第一个方程，得

$$.0001u+.9999=1 \text{或} u=1$$

但是，在v值.9999的第四位数字，也即万分位上加1，得$v=1$。将它代入到第一个方程得

$$.0001u+1=1 \text{或} u=0$$

得到的这个u并不是方程的解。对这个正常矩阵A'，正向消去法却完全地不能使用。因子L，D和U都与原矩阵相差太大

$$A'=\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 10,000 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} .0001 & 0 \\ 0 & -9999 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 10,000 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

不稳定的根源在于主元素.0001太小。

从数量上看，A接近于奇异矩阵，A'则不。把A右下角的元素变为1（或者对另外的元素作微小的改变），A就成了奇异矩阵。A'则不然。接近于奇异几乎就等于病态。第七章第二节我们将要讲清这一点。矩阵A'的正常性之所以被破坏以及医治的方法，这就是我们的第三点

1L 零在理论上不能作主元，接近于零的数在实际计算中就不能作主元，这两种情形都必须进行行交换。一般情况下，计算机必

须把主元位置上的元素与同列下方的每一个元素相比较，选出最大的一个，并用行交换把它换到主元位置上来，这种方法叫做列选主元法。

在矩阵A'中，将主元位置上的.0001与同列下方的1相比较。结论是应该用行交换把1换到主元位置上来。用矩阵的话说，就是要用一个置换矩阵P去乘矩阵A'。所得矩阵$A''=PA'$的分解式为

$$A''=\begin{bmatrix} 1. & 1. \\ .0001 & 1. \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ .0001 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & .9999 \end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

两个主元素1和.9999不像原来的.00001与−9999差得那么远了。

列选主元法的挑选范围是同列下方各元素。把挑选范围扩大到右方各列，可以选到更大的主元，这种扩大了范围的挑选叫全选主元法。全选主元法中不仅要做行交换，还要做列交换，才能把选到的最大主元换到主元位置上来（换句话说，要给未知数重新标号，或者要乘以置换矩阵）。全选主元法虽然可以选到更大的主元，但太化费机器时间，费用太高。因而，一般使用的都是列选主元法。

最终我们得到的数值线性代数的基本算法是列选主元消去法。也还可以有所改进，譬如把一行一列增大相同的倍数。但我们已经把怎样用计算机处理线性方程组的基本点向读者交待清楚了。理论上，线性方程组的解法是，先求出A^{-1}，再用A^{-1}去乘b。比起理论解法，这里让读者化费的时间和耐心要多得多。我希望找到更为简便易行的方法，但我不认为有这样的方法存在。

练习1.5.11 用Gauss-Jordan法按两种方式求Hilbert矩阵

$$A=\begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5} \end{bmatrix}$$

的逆矩阵。(i)准确计算；(ii)舍入成三位数字计算。注意，这里的A是一个医治不了的病态矩阵，选择主元法无济于事。

练习1.5.12 比较在直接消去和列选主元消去之下，矩阵

$$A=\begin{bmatrix} .001 & 0 \\ 1 & 1000 \end{bmatrix}$$

的主元（这是一个在进行消去之前就需加大主元的例子）。

练习1.5.13 试解释为什么在列选主元之下，L 中的 l_{ij} 都满足 $|l_{ij}|\leqslant 1$。试证明，如果 A 的元素满足 $|a_{ij}|\leqslant 1$，那么第一步消去（变第一列主元下面的元素为零）之后，所有元素都以 2 为界；第 k 步消去之后，所有主元都以 2^k 为界。请构造一个 3×3 的 A，使得 $|a_{ij}|\leqslant 1$，$|l_{ij}|\leqslant 1$，最后一个主元为 4。

§1.6 带状矩阵，对称矩阵及其应用

这一节要做两件事。一件是，介绍一种从实际中提出大线性方程组的方法。到现在为止，本书尚未涉及应用，原因是对建筑工程或经济中一个大的实践问题进行完整的描述，必定要用到太多的非数学的东西。但有一项普遍而又重要的应用，它不需大量的准备知识。本节要做的两件事都从这项应用出发来进行。另一件是，介绍常见的一类系数矩阵所具有的一些特殊性质，实际中遇到的矩阵常常是对称的，并且有很多元素为零。称这种矩阵为稀疏矩阵。它的非零元素远少于n^2个，因而它的计算比全矩阵要简单得多。稀疏矩阵中最为常见的，又是那种非零元素集中在主对角线两侧的矩阵。称这种矩阵为带状矩阵。我们要介绍的就是这种带状矩阵所具有的特殊性质，和这些性质在消去过程中所产生的影响。

前面说的应用就是变连续问题为离散问题。连续问题未知数的个数是无穷的(它要求对每一个 x 求出$u(x)$)。数字计算机不能求连续问题的解。因而只能用离散问题去逼近连续问题。当然，所用离散问题中未知数的个数越多逼近的程度就越高，计算量也就越大。一个简单，但很典型的连续问题是微分方程

$$-\frac{d^2u}{dx^2}=f(x),\quad 0\leqslant x\leqslant 1. \tag{25}$$

这是未知函数 u 的线性方程，非齐次项是 f。该问题有不确定性。任何一个组合 $C+Dx$ 加到任何一个解上去，得到的都又是一个解。这是因为 $C+Dx$ 的二阶导数为零。给区间的端点加上"边界条件" $u(0)=0$，$u(1)=0$ (26)

问题就成为确定的了。(25)加上边界条件(26)称为两点边值问题。它描述的现象不是瞬态的，而是稳态的。譬如，可以是一根棒上的温度分布，端点处的温度为0°，热源为 $f(x)$。

本节我们要做的第一件事是提出一个大线性方程组，也即提出一个有限维的离散问题。因而我们只能取 $f(x)$ 的有限多个值，譬如在等距离节点 $x=h$，$x=2h$，…，$x=nh$ 处的值。要计算的也就是真解 u 在这些节点处的近似值 u_1，…，u_n。端点 $x=0$ 和 $x=1=(n+1)h$ 处的准确值 $u_0=0$，$u_{n+1}=0$ 是已经给定了的。

第一个问题是用什么来代替 d^2u/dx^2。由于导数是差商的极限，因而我们可用差商来代替导数。当然，只能取有限个点处的差商，也即，不许 h（或 Δx）趋向于零。一阶导数的差商可以是

$$\frac{du}{dx}\approx\frac{u(x+h)-u(x)}{h}\quad\text{或}\quad\frac{u(x)-u(x-h)}{h}$$

$$\text{或}\quad\frac{u(x+h)-u(x-h)}{2h}. \tag{27}$$

最后一个近似式关于 x 对称，因而它的近似程度比前两个好。二阶导数的差商近似式只有一个，它用到 x 和 $x\pm h$ 三处的值

$$\frac{d^2u}{dx^2}\approx\frac{u(x+h)-2u(x)+u(x-h)}{h^2}. \tag{28}$$

它也关于 x 对称。$h\to 0$ 时上式右端趋向于 d^2u/dx^2。但我们保持 h 为常数。

在节点 $x=jh$ 处，将微分方程 $-d^2u/dx=f(x)$ 中的微分换为(28)，再乘以 h^2 得

$$-u_{j+1}+2u_j-u_{j-1}=h^2f(jh). \tag{29}$$

对每一个 j ($j=1, 2, \cdots, n$)有一个这样的方程，总个数为n。首尾两个方程中u_0和u_{n+1}长边值条件，是已知的，可以移右端，归入介次项。在我们这里它们都为零。稳态方程（29）的左端可改写为$(u_j-u_{j-1})+(u_j-u_{j+1})$。也即，节点$jh$处的$u_j$减去左侧的$u_{j-1}$，加上$u_j$减去右侧的$u_{j+1}$，和等于$h^2f(jh)$。

(29)所表示的 n 个方程可以用矩阵写成$Au=b$。我们取 $h=\frac{1}{6}$，或$n=5$，则

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & -1 & 2 & -1 & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} f(h) \\ f(2h) \\ f(3h) \\ f(4h) \\ f(5h) \end{pmatrix}. \quad (30)$$

从现在开始，我们只对方程（30）进行讨论，而不再考虑它是怎样产生的。（30）这种类型的系数矩阵A，阶数 n 可以很大，由于结构特殊而具有一些特殊的性质。首先，它的非零元素都集中在以主对角线为中心线的三条相邻对角线上。换句话说，只要行数 i 与列数 j 的差大于1，a_{ij}就为零，即$a_{ij}=0$，$|i-j|>1$。我们称这种矩阵为三对角矩阵。由于三对角矩阵的元素中有大量的零，这使消去法变得大为简单。

下面我们讨论A的另外两条极重要的性质，和它们对消去法的影响。

(1)矩阵A是对称的；以主对角线为对称轴，对称的元素相等：$a_{ij}=a_{ji}$。换句话说，第一列与第一行相等，第二列与第二行相等，类推。显然，计算机可以只存A的下三角部分，主对角线上面部分可根据下三角部分直接写出。

最重要的一点是这对称性不因消去过程而改变（见习题），因而消去过程中对主对角线上面部分可以不进行计算。对称性使得存储量和计算量都减少了几乎一半。

在介绍对称性的另一效果之前，我们先引进转置矩阵。任何一个矩阵A，让它绕主对角线转180°，变列为行，得到的就是它的转置矩阵。记为A^T。对称就意味着$A^T=A$，并有下列结论

1M、 如果A是对称的，又如果A能分解为$A=LDU$，那么下三角矩阵L的列与上三角矩阵U的对应行相同。也即L，U互为转置矩阵：$L=U^T$，$U=L^T$。

证明 将分解式$A=LDU$的两端转置。A对称，因而左端仍为A。右端各因子转置后按相反的次序相乘（如同逆矩阵那样），也即，$A^T=U^TD^TL^T$。第一个因子U^T是变U的行为列得到的下三角矩阵。D^T，L^T是对角矩阵和上三角矩阵。这样我们就有了$A^T=A$的一个新的"LDU分解式"。由于任何矩阵的LDU分解式是唯一的（见本章第四节1F）得到$L=U^T$，$D=D^T$，$U=L^T$，证毕。

这里提到的转置矩阵，第三章第一节我们将进行讲解。

有限差分矩阵A的另一条性质是

（2）矩阵A是正定的。第六章我们将给正定下定义（只对对称矩阵），那里的定义跟消去法没有什么关系，后面我们将推出正定性的一个等价定义：对称矩阵，当且仅当它的主元素都为正数时是正定的。这一定义与消去法关系密切。它表明，对正定矩阵可以不进行行交换，消去法可按原矩阵的行依次进行，从而对称性不会因行交换而受到破坏。

正定性决定了主元不为零，但进一步我们要问主元素是否接近于零，即是否够大。正定性的另一推论回答了这一问题，这一推论是计算上最重要的。推论说：正定矩阵在计算过程中完全不必进行行交换。对我们的矩阵来说，这一推论可以从因子L，D，U看出。

注 前一节中的病态矩阵

$$A=\begin{bmatrix}1 & 1\\1 & 1.0001\end{bmatrix}$$

和前一节习题中的Hilbert矩阵都是对称正定矩阵，它们对舍入误差都是敏感的。也即，对称正定不保证计算上的稳定。

矩阵A的性质就说到这里。下面我们考察三对角矩阵对消去法所产生的影响。假定已进行了消去法第一步，第一个主元下方的元素已经为零

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & -1 & 2 & -1 & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ 0 & \frac{3}{2} & -1 & & \\ & -1 & 2 & -1 & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

该矩阵比一般的 5 × 5 矩阵简单处主要有两点

(a)主元正下方只有一个非零元素。只需从第二行中减去第一行的倍数；一般矩阵则需从第二行及以下各行中减去第一行的倍数。

(b)从第二行减去第一行倍数这一运算极为简单。决定了倍数$l_{21}=-\frac{1}{2}$之后，只需做减去主元右侧元素这一个乘-减运算。

可见第一行第一列中的零使得第一步大为简化。由于三对角性质不因消去过程而改变（在不做行交换的情况下！）我们有

(c)消去过程第二步以及以下各步也都具有(a)，(b)这两点简化。

现用不同的方式来总结一下上述简化，上述简化从A的分解式LDU中看得最清楚，

$$A=\begin{pmatrix} 1 & & & & \\ -\frac{1}{2} & 1 & & & \\ & -\frac{2}{3} & 1 & & \\ & & -\frac{3}{4} & 1 & \\ & & & -\frac{4}{5} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{2}{1} & & & & \\ & \frac{3}{2} & & & \\ & & \frac{4}{3} & & \\ & & & \frac{5}{4} & \\ & & & & \frac{6}{5} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1-\frac{1}{2} & & & \\ & 1-\frac{2}{3} & & \\ & & 1-\frac{3}{4} & \\ & & & 1-\frac{4}{5} \end{pmatrix}$$

(*a*)—(*c*)可以陈述为：三对角阵的因子 L 和 U 是二对角阵，且互为转置；主元 d_i 全为正数*，且随 n 的增大而趋向于极限＋1。这种矩阵最适于用计算机进行计算。

上述简化使得运算次数大为减少。消去法的每一步只需两次运算：一次以主元素作除数的除法，一次乘-减运算。步数为 n，因而正向消去的运算次数从 $n^3/3$ 减少为 $2n$。类似地，反向代入的次数由 $n^2/2$ 减少为 $2n$。可见三对角方程组的运算次数跟 n 成比例，而不是跟 n 的更高次方成比例。三对角方程组 $Ax=b$ 可以很容易地解出。

更一般地，假定 A 是一个带状矩阵，即其非零元素全都在一个以主对角线为中心线的带状区域内。记半带宽为 ω，即 $|i-j|\geqslant\omega$ 时 a_{ij} 为零（见图1.2），则非零对角线共 $2\omega-1$ 条，主对角线及其两侧，每侧 $\omega-1$ 条。$\omega=1$ 时为对角矩阵，$\omega=2$ 时为三对角

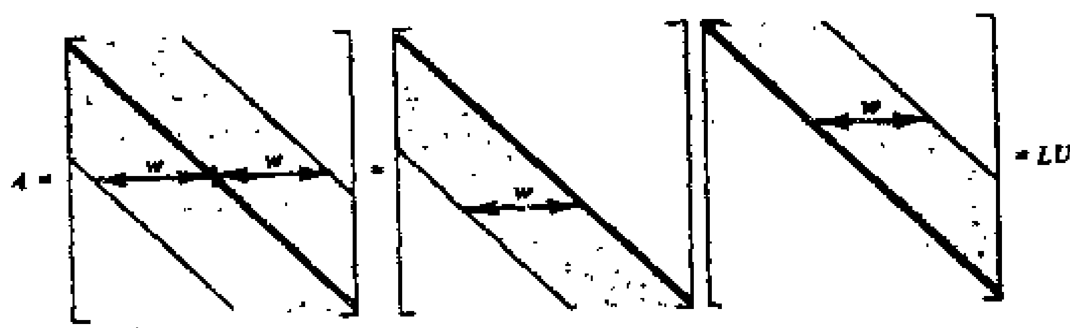


图 1.2

---

* 后面我们将看到主元素的积等于 A 的行列式，$\det A=6$。

矩阵，$\omega=n$ 时为全矩阵。

关于三对角矩阵的(a)—(c)，对一般的带状矩阵仍然适用。在消去法第一步，主元正下方需消去的非零元素是$\omega-1$个，再往下的元素已经为零，又第一行中的非零元素只有ω个，因而每消去一个元素只需进行ω次运算。可见第一步消去，即对第一列进行消去所需的运算次数为 $\omega(\omega-1)$。完成第一步消去之后，得到的依然是半带宽为ω的带状矩阵。正向消去的总步数为n，因而带状矩阵正向消去所需的总运算次数约为$\omega^2 n$。这个次数也是与n成比例的。当ω接近于n时，矩阵成为全矩阵，运算次数也大致地成为n^3。为得到准确的运算次数，需考虑当消去法进行到矩阵右下角时，半带宽不是ω，比ω要小。为得到L，D和U（不假定A对称），所需进行的除法和乘-减运算次数为 $P=\frac{1}{3}\omega(\omega-1)(3n-2\omega+1)$。当$A$为全矩阵时，$\omega=n$，我们得到 $P=\frac{1}{3}n(n-1)(n+1)$*。总之，带状矩阵A的三角因子L和U也是带状的，且宽度相同，正向消去和反向代入都很快。

关于运算次数，我们就讲到这里，但要强调一点，我们所举的有限差分矩阵A，它的逆矩阵是全矩阵。求A^{-1}所需的运算次数比求L和U所需的要大很多。下一步，用A^{-1}左乘b以求得$x=A^{-1}b$所需的运算次数为n^2，而解$Lc=b$和$Ux=c$只需$4n$次运算，正向消去和反向代入最后得到的是$x=U^{-1}c=U^{-1}L^{-1}b=A^{-1}b$。

我们希望通过这个例子能达到两个目的。一个是使读者进一步认识消去过程（我们假定读者现在对它已经认识清楚）；一个是让读者看到一个这类大线性方程组的实例。下一章我们讲线性方程组$Ax=b$的“理论”结构，讲x的存在性和唯一性。

练习1.6.1 将我们刚举过的这个例子中的$a_{11}=2$改为$a_{11}=1$，求新三对角矩阵的分解式LDU。

---

*我们指出，这个P必定是整数。这是因为$n-1$，n，$n+1$是挨着的三个整数，因而其中必定有一个被3除得尽。

练习1.6.2 试消去对称矩阵

$$A=\begin{bmatrix} a & b & c \\ b & d & e \\ c & e & f \end{bmatrix}$$

中主元a正下方的各元素。验证经这一步消去之后，得到的2 × 2矩阵依旧是对称的。由此认识每一步消去都不改变对称性。

练习1.6.3 求逼近

$$-\frac{d^2u}{dx^2}=f(x),\quad \frac{du}{dx}(0)=\frac{du}{dx}(1)=0$$

的5 × 5矩阵A，边界条件换为$u_0=u_1$，$u_6=u_5$。证明所得矩阵作用于常数向量(1，1，1，1，1)，结果为零，A是奇异矩阵。类似地，再证明如果$u(x)$是连续问题的解，那么$u(x)+1$也是；题给的边界条件去不掉$C+Dx$的不确定性，因而解不唯一。

练习1.6.4 $h=\frac{1}{4}$，$f(x)=4\pi^2\sin 2\pi x$时差分方程(29)为

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix}=\frac{\pi^2}{4}\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix}.$$

解出u_i，并将求得的解与真解$u=\sin 2\pi x$在$x=\frac{1}{4}$，$x=\frac{1}{2}$，$x=\frac{3}{4}$处的值相比较，算出误差。

复　习　题

1.1 试对矩阵

$$A=\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \quad 和 \quad B=\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

计算$A+B$和AB。

1.2 对上题矩阵计算A^{-1}，B^{-1}和$(AB)^{-1}$。

1.3　用正向消去和反向代入解

$$
\begin{aligned}
2u - 3v \quad\quad &= 8 \\
4u - 5v + w &= 15 \\
2u \quad\quad + 4w &= 1。
\end{aligned}
$$

1.4　将上题的系数矩阵分解为 $A = LU$。

1.5　一个三个方程的方程组已给，试写出矩阵 E，它能起到从第三个方程减去第二个方程的作用。

1.6　试写出 8×8 矩阵 P，它能起到交换一、三两个方程的作用。

1.7　什么样的 8×8 矩阵能起到乘第二个方程以 -1，保持另外两个方程不变的作用。

1.8　试用消去法判断下面的方程组是否有解

$$
\begin{aligned}
u + v + w &= 0 \\
u + 2v + 3w &= 0 \\
3u + 5v + 7w &= 1
\end{aligned}
$$

1.9　试用消去法和行交换解

$$
\begin{aligned}
u + v - w &= 2 \\
3u + 3v + w &= 2 \\
u \quad\quad + w &= 0
\end{aligned}
$$

1.10　试分解

$$
A = \begin{bmatrix} 1 & 4 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 3 & 1 \end{bmatrix}
$$

为 LU。

1.11　求

$$
\begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}
$$

的逆矩阵。

1.12　一个 8×8 矩阵，它的任何一行都不是另外一行的倍数。问该矩阵是否一定有逆矩阵？请举例。

1.13　用高斯-约当法求

$$A=\begin{bmatrix}1 & 1 & 0\\0 & 1 & 1\\0 & 0 & 1\end{bmatrix}$$

的逆矩阵。

1.14　试解释为什么三角阵的逆矩阵也是三角阵。

1.15　设E是一个2×2矩阵，它起到加第一个方程到第二个方程上去的作用。问E^{50}起什么样的作用？试写出E，E^{50}和$50E$。

1.16　试写出一个有无穷多解的2×2方程组。

第二章　线性方程组

§2.1　向量空间和向量子空间

第一章讲了消去法，它每步消去一个未知数，把方程组 $Ax=b$ 化简。消去法不仅使求解变得容易，并且还回答了解的存在和唯一性这两个理论问题。为了理解长方矩阵和进一步理解方阵，我们要再用一节篇幅来讲消去法。那时消去法就讲全了。消去法是根据单个系数来认识方程组，本章我们用另一方式取得对它更为深入的认识。

为此我们引进向量空间的概念。我们不用公理法而用一个例子来引进，这例子是两个未知数三个方程的方程组

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 5 & 4 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix}. \tag{1}$$

如果未知数的个数多于方程，我们可能求得一个，甚至无穷多个解（虽然并不总是如此）。上述的例子是方程的个数多于未知数，$m>n$。这种情况下，通常无解，只对某些右端有解。事实上，只对所有可能的三维向量 b 的一个很“薄”的子集才有解。

该子集的一种描述为

2A　方程组 $Ax=b$，当且仅当 b 可以表示为 A 的列的组合时才可解。

这一描述只不过是相当于把 $Ax=b$ 改写为

$$u\begin{bmatrix} 1 \\ 5 \\ 2 \end{bmatrix}+v\begin{bmatrix} 0 \\ 4 \\ 4 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix}. \tag{2}$$

它依旧是两个未知数的三个方程。但现在问题成了求权 u 和 v，使

u乘上第一列，v乘上第二列，然后相加，和为b。方程组只在这样的权存在时才可解，且权（u，v）就是解x*。

这样，使方程组有解的右端（以下简称为有解右端）b的子集，就是A的列的所有组合的集。一个有解右端是第一列，此时解为$u=1$，$v=0$；再一个有解右端是第二列，此时解为$u=0$，$v=1$；第三个有解右端是$b=0$，此时解为$u=0$，$v=0$（对于任何的系数矩阵，$u=0$，$v=0$都是$b=0$时的解）。

现在我们考虑这两列的所有组合，并几何地来描述它们。$Ax=b$当且仅当b在两个列向量所张成的平面上时，才可解(图2.1)。这两个列向量是连接原点（0,0,0）到点（1,5,2）和(0,4,4）的线段。平面是由这两个线段所在直线决定的。平面不限制向量的分量必须为正。权$u=-1$，$v=1$产生$b=(-1,-1,2)$。

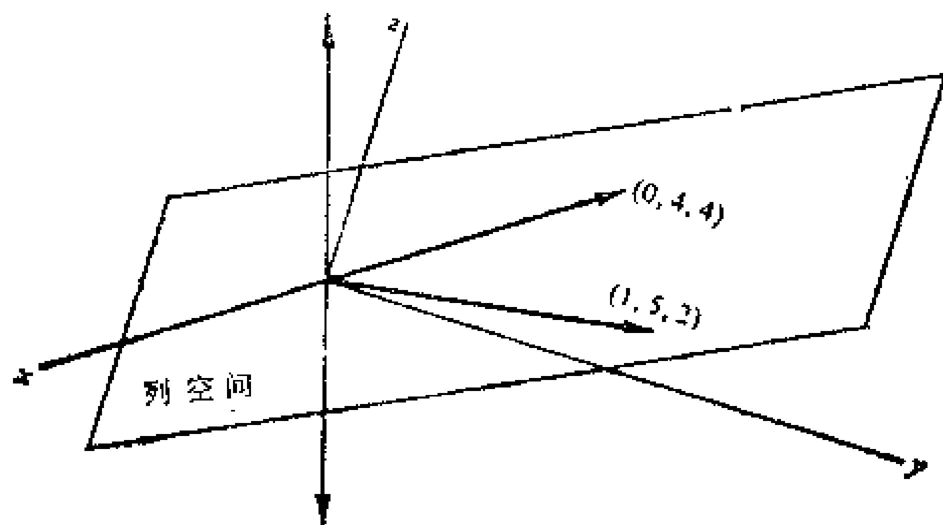


图 2.1 列空间，三维空间中的一个平面

这平面解释了线性代数理论中一个最基本的概念——向量空间。向量空间是满足下面两点要求的向量全体：

(i)向量空间中任何两个向量b，b'的和$b+b'$属于该向量空间；

(ii)b为向量空间中任何一个向量，c为任何一个数量常数。b的c倍cb属于该向量空间。

换句话说，我们平面内的向量集合对向量加法和数乘是封闭

* 我们称系数为权，这并不限制权必须为正数。

的*，平面是分量个数为三的所有向量(b_1, b_2, b_3)的子集。所有分量个数为三的向量就是整个三维向量空间。我们的平面，实际上是一个子空间。换句话说，是一个自身也构成空间的子集。我们称它为矩阵A的列空间，因为它是由A的列张成的。

我们考察一下矩阵列空间的两个特殊情况。一个特殊情况是$n \times n$零矩阵$A=0$。它的列空间只包含一个向量$(0, \cdots, 0)$。这确实是一个列空间（非空！），它对向量加法和数乘都封闭。和$0+0$，数乘$c0$都是零向量，都属于这个空间，这是最小的列空间。另一个特殊情况，例如来自$n \times n$单位矩阵$A=I$。它的列空间是整个n维空间。每一个n个分量的列向量都可以由单位矩阵的列产生。我们限制分量为实数。记实n维向量空间为R^n。在图2.1中平面是R^3的子空间。

我们用几个例子来说明子集和子空间的不同。以后还要举更多这样的例子。每一个例子中都要求判断(i)，(ii)是否被满足。

例 1 设S由一个给定向量v，譬如说$(1, 4, -2)$的所有倍数组成。S充满三维空间R^3中的一条直线。这条直线通过坐标原点，零倍$0v$是v的倍数中的一个。这个子集S实际上是一个子空间。这条直线任何一个向量的任何倍数，以及这条直线上任何两个向量的和都在这条直线上。

例 2 设S只包含两个向量$(0, 0, 0)$和$(1, 0, 0)$。这个S不满足(ii)，倍数$5(1, 0, 0)$就不属于S、(i)也不满足，我们可以取b，b'都为$(1, 0, 0)$，那么$b+b'$就不属于S。

例 3 一条直线平行于x轴，S由这条直线上的所有向量组成。分量x任意，但$y=3$，$z=4$是固定的。条件(i)、(ii)这些子集都不满足。这条直线上两个向量的和中有$y=6$，$z=8$，但它在另外一条直线上。零向量不在S中。条件(ii)中的倍数可以是零倍，因而任何一个子空间都应该包含零向量。

---

* 向量空间的定义应该给出加法和数乘所应满足的各项规则，如$b+b'=b'+b$。这些规则也是n维空间R^n应该满足的。

引论可以结尾了。几何上没有什么要讲了，主要的内容从图2.1上都看得清楚。

(i)我们的方程组 $Ax=b$ 中所有有解的 b 构成一个二维列空间。A 的两列张成一个平面，少于两个向量张不成平面。

(ii)过原点垂直于平面的向量全都在一条直线上。这些向量也构成一个子空间，维数为一*。

上述两点从几何上看都相当明显。但到目前为止，我们还没有用代数方法来表达它们，验证它们，或把它们推广到 $m\times n$ 方程组（也即推广到 m 维空间中的 n 列）。这是我们对 $Ax=b$ 的讨论所要达到的两个目的中的一个。

本章要达到的第二个目的与第一个相比是"对偶"的，我们不只关心有解右端 b，还关心可能的所有解 x。右端 $b=0$ 时恒有特解 $x=0$，并可以有无穷多个别的解（当未知数的个数多于方程的个数时（$n>m$），我们将证明 $Ax=0$ 在平凡解 $x=0$ 之外，必定有另外的解）。$Ax=0$ 的解也构成一个向量空间，称它为 A 的化零空间。与有解的 b 所成列空间是 R^m 的子空间一样，A 的化零空间也是 R^n 的子空间。

对于前面的例子，求解 $Ax=0$ 不难，也即化零空间不难求得。由

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 5 & 4 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

的第一个方程得 $u=0$，代入第二个方程，得 $v=0$。这里化零空间只包含一个零向量，也即在右端 $b=0$ 时满足 $Ax=0$ 的列组合只有一个，在这一列组合中 $u=v=0$。

如果我们把原来两列的组合加进去作为第三列

---

* 读者应该注意到了，"维数"有两种含义，一种是n维向量的"维数"，指的是有n个分量，或者说指的是它为 R^n 的一员；另一种是子空间的维数。2J将给它下定义 R^4 中的一条直线是一维子空间，它的点是四维向量。

$$B=\begin{bmatrix}1 & 0 & 1\\5 & 4 & 9\\2 & 4 & 6\end{bmatrix},$$

则情况就不同了，B的列空间同于A的列空间，增加的一列是原来两列的和，因而也在图2.1的平面内。但新矩阵B的化零空间就不同了。它包含向量（1,1,−1）的任何倍数

$$\begin{bmatrix}1 & 0 & 1\\5 & 4 & 9\\2 & 4 & 6\end{bmatrix}\begin{bmatrix}c\\c\\-c\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\0\\0\end{bmatrix},$$

也即，B的化零空间是一条直线，它包含所有的点$x=c$，$y=c$，$z=-c$，c为$-\infty$，∞之间的任何数。与任何子空间一样，这条直线通过原点。这个一维化零空间有一个垂直空间（一个平面）。该垂直空间与矩阵的行有直接关系，有着特别的重要性。

总之，对任何一个方程组$Ax=b$，我们都要求出所有有解右端b，求出$Ax=0$的所有解。也即，我们要计算出上述空间的维数，和张成上述空间的适当的向量集合。本章结束时，我们希望弄清楚四个子空间，A的列空间，A的化零空间，以及这两个空间各自的垂直空间。这四个空间彼此之间及这四个空间与A都有密切的关系。

练习2.1.1 为证明对向量空间，要求(i)，(ii)是彼此独立的，请构造二维空间的两个子集：

（a）对向量加法和向量减法都封闭，但对数乘不封闭；

（b）对数乘封闭，但对向量加法不封闭。

练习2.1.2 试判断R^3的下列子集是否为子空间。

（a）第一个分量$b_1=0$的向量平面。

（b）$b_1=1$的向量b所成平面。

（c）$b_1b_2=0$的向量b（这是平面$b_1=0$和平面$b_2=0$这两个子空间的并）。

（d）单个向量$b=(0,0,0)$。

(e)向量 $u=(1,1,0)$ 和 $v=(2,0,1)$ 的所有组合。

(f)满足 $b_3-b_2+3b_1=0$ 的向量 (b_1,b_2,b_3)。

练习2.1.3 验证 A 的化零空间是子空间，也即验证任何齐次方程组 $Ax=0$ 的解 x，对加法和数乘都封闭。举出一个 $b\neq 0$ 时，$Ax=b$ 的解不是子空间的例子。

§2.2 m×n方程组的解

对于方阵，消去过程我们已经很熟悉了，对于长方矩阵，消去过程，我们只需举一个例子，就可以解释清楚。正向消去没有多大差别，反向代入有些不同。

举例之前先看一下方程 $ax=b$。这是一个未知数的一个方程，显见有三种可能：

(i) $a\neq 0$。此时对任何的 b 都有解 $x=b/a$，而且这个解是唯一的。这是非奇异的情形。

(ii) $a=0$，$b=0$。此时有无穷多解。任何 x 都满足 $0x=0$。这是不确定情形，解存在，但不唯一。

(iii) $a=0$，$b\neq 0$。此时无解，没有 x 可以满足 $0x=b$。这是不相容情形。

对方阵，这三种可能都可以发生。对长方阵，则不可能有情形(i)，即不可能对每一个 b 解都存在且唯一。

我们选择一个不太明显的例子。先不管右端而单独地考察 3×4 矩阵

$$A=\begin{bmatrix} 1 & 3 & 3 & 2 \\ 2 & 6 & 9 & 5 \\ -1 & -3 & 3 & 0 \end{bmatrix}.$$

主元 $a_{11}=1$ 不为零，照通常的消去运算化该主元正下方的元素为零，得

$$A \to \begin{bmatrix} 1 & 3 & 3 & 2 \\ 0 & 0 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 6 & 2 \end{bmatrix}.$$

第二个主元为零，它正下方的元素也为零，行交换无济于事。如果是方阵，据此即可断定矩阵是奇异的，消去过程应该停止，对长方矩阵则不然，应该考察下一列。下一列的主元不为零。从第三行减去第二行的两倍，得

$$U = \begin{bmatrix} 1 & 3 & 3 & 2 \\ 0 & 0 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

第四列主元处的元素已经为零，正向消去完成。

最终得到的U是一个上三角阵，或者更确切地说是一个上阶梯阵。主对角线下面的元素都为零，非零元素u_{ij}的i，j满足$i \leqslant j$。对长方阵，这些非零元素摆成的区域是一个阶梯形。由图2.2可见，对一般长方阵，U的非零元素所成区域的下沿是台阶状的。图中带圈的星表示非零主元，星表示可以不为零的元素。

我们将图2.2的特点陈述如下：

$$U = \begin{bmatrix} \circledast & * & * & * & * & * & * & * & * \\ 0 & \circledast & * & * & * & * & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & \circledast & * & * & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \circledast \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

图 2.2 典型阶梯阵U的非零元素

(i)非零行集中在上方（否则进行交换），非零行的第一个非零元素是主元。

(ii)主元的正下方是消去法得到的零。

(iii)每一个主元都位于它上一行主元的右面，这就形成了阶梯形。

练习2.2.1 图 2.2 的阶梯形状是在一些可以作主元的元素为零（图中第 3 列和第5-8列就是）的情况下形成的。试画出主元都不为零情况下5×9矩阵的阶梯阵U。试举例证明，即使在2×2情况下，两个阶梯阵的和也可以不是阶梯阵，也即两个阶梯阵相加可以消去主元。

我们是从A直接得到U。读者会问，这里的U和A，是不是也与前面一样，由一个L相联系，即$A=LU$呢？没有理由不是。首先消去步骤是一样的，每步同样都是从一行减去另一行的倍数。其次，每步还原也与前面一样，是把减掉的倍数加回去。各步的还原可以总起来由一个L一次完成，

$$L=\begin{bmatrix}1&0&0\\2&1&0\\-1&2&1\end{bmatrix}.$$

读者应该验证$A=LU$。请注意L不是长方阵而是方阵。它的阶数$m=3$，等于A和U的行数。

我们的例子中没有进行行交换，一般情况下是要进行的。与§1.5一样，那就要引进置换矩阵P。先用P左乘A，就得到经过了所有行交换的矩阵。对新得到的矩阵就可以顺利地进行消去法。由于这里在一列中选不到主元时，可以转到考虑下一列，因而不要求A非奇异。

下面是本节主要定理。

2B 任何一个$m\times n$矩阵都对应一个置换矩阵P，一个主对角元为 1 的下三角阵L，和一个上阶梯阵U，使得$PA=LU$。

我们的目的是在解存在的情况下，写出$Ax=b$的解。

先考虑齐次，也即$b=0$的情形。此时行运算不改变方程右端的0，$Ax=0$化简为$Ux=0$，

$$Ux\begin{bmatrix}1&3&3&2\\0&0&3&1\\0&0&0&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}u\\v\\w\\y\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\0\\0\end{bmatrix}.$$

未知数 u，v，w，y 分为两组，一组叫基本变量，由非零主元所在列的变量组成。第一，第三列的主元不为零，因而 u，w 就是基本变量；另一组叫自由变量，由零主元所在列的变量组成，第二，第四列的主元为零，因而 v，y 是自由变量。

为求得 $Ux=0$（也是 $Ax=0$）的通解，让自由变量取任意值。我们就取 v 和 y 为任意值。这样基本变量就完全确定了，就可以用反向代入，求出它的以自由变量表示的表达式。反向代入

$$\text{由 } 3w+y=0 \text{ 得 } w=-\frac{1}{3}y.$$

$$\text{再由 } u+3v+3w+2y=0 \text{ 得 } u=-3v-y.$$

有两个自由而独立参数 v，y 的方程组,其解具有"双无穷"。通解为组合

$$x=\begin{pmatrix} -3v-y \\ v \\ -\frac{1}{3}y \\ y \end{pmatrix}=v\begin{pmatrix} -3 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}+y\begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ -\frac{1}{3} \\ 1 \end{pmatrix}. \qquad (3)$$

我们来考察 $Ax=0$ 的写成了形式(3)的解。向量$(-3,1,0,0)$是自由变量 $v=1$，$y=0$ 时的解，向量$(-1,0,-\frac{1}{3},1)$是自由变量 $v=0$，$y=1$ 时的解。$Ax=0$ 的一切解都是这两个解的线性组合。这与2A的情形类似，那里所有有解的右端 b 都是矩阵两列的组合。这里把 A 的两列换成了 A 的化零向量（即 $Ax=0$ 的解）。解向量以 A 的列数为维数，分量个数是 n 不是 m。

几何上，在所有可能的向量 x 所成的四维空间中，$Ax=0$ 的解构成一个二维子空间——A 的化零空间。可以把这个化零空间看成由向量$(-3,1,0,0)$和$(1,0,-\frac{1}{3},1)$所成的一个"平面"（画不出四维图形来！）这两个向量的组合构成一个集合。该集合对加法和数乘封闭。这两种运算构成这两个向量的大量组合。所有这些组合构成化零空间。

我们可以介绍一个极重要的定理了。考虑一个列数大于行数，即 $n>m$ 的矩阵。由于最多可以有 m 个非零主元（每行一个），因而至少有 $n-m$ 个自由变量。自由变量的个数可以多于 $n-m$ 个，U 有为零的行时，如我们所述的例子，自由变量的个数就多于 $n-m$。让一个自由变量取任何值，可得如下结论：

2C 未知数的个数多于方程的个数时，齐次方程组 $Ax=0$ 必有非平凡解，即必有 $x=0$ 以外的解 x。

解 x 的任何倍数 cx 都满足 $A(cx)=0$，因而我们的结论实际上是有无穷多解。每增多一个自由变量，化零空间就增多 n 维空间中一条直线。化零空间是维数等于自由变量个数的子空间。

非齐次，即 $b\neq 0$ 时，情形就很不同了。回到我们的例子 $Ax=b$。对它的两端进行化 A 为 U 的运算，得上阶梯形组 $Ux=c$，

$$\begin{bmatrix} 1 & 3 & 3 & 2 \\ 0 & 0 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u \\ v \\ w \\ y \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2-2b_1 \\ b_3-2b_2+5b_1 \end{bmatrix}, \qquad (4)$$

右端向量 c 是消去运算所得结果，与前章一样，$c=L^{-1}b$。

该方程组是否有解还不清楚。首先是第三个方程，它的左端为零，因而，如果 $b_3-2b_2+5b_1\neq 0$，该方程组就无解。换句话说，有解右端 b 的集合不是整个的三维空间。即使变量的个数比方程的个数多得更多，也可以无解。2A讲了考察这种方程组的另外一种方法：$Ax=b$ 当且仅当 b 属于 A 的列空间时才可解。A 的列空间由 A 的列（不是 U 的列）

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 3 \\ 6 \\ -3 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 3 \\ 9 \\ 3 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 2 \\ 5 \\ 0 \end{bmatrix}$$

张成。虽然这里是四个向量，但它们的线性组合只充满三维空间中一个平面。这是因为第二列是第一列的 3 倍，第四列等于第一列加上第三列的 $\frac{1}{3}$（注意，相关列第二列、第四列恰是没有主元的列）。

现在我们可以用两种完全不同的方式来描述列空间。一方面，它是列1和列3张的成平面，列2，列4在该平面中，这是两个不增加新东西的列。另一方面，它是由满足 $b_3-2b_2+5b_1=0$ 的点 (b_1, b_2, b_3) 所构成的平面，这是为使(4)有解，b 所必须满足的约束。读者会相信这两个平面是相同的，A 的四个列向量都满足这一约束。几何上，我们将看到向量(5，-2，1)垂直于上述平面，因而也就垂直于 A 的每一列。

假定 b 在上述平面上，因而属于 A 的列空间，那么 $Ax=b$ 的解就容易求得。方程组(4)的最末一个方程已经为 $0=0$。与前面一样，让自由变量 v 和 y 取任何值，那么反向代入

从 $\quad 3w+y=b_2-2b_1$ 得 $w=-\frac{1}{3}y+\frac{1}{3}(b_2-2b_1)$

再从 $\quad u+3v+3w+2y=b_1$ 得 $u=-3v-y+3b_1-b_2$。

所得解又是有着双重无穷。将 u，w 用 v，y 表示出来，则通解为

$$x=v\begin{bmatrix}-3\\1\\0\\0\end{bmatrix}+y\begin{bmatrix}-1\\0\\-\frac{1}{3}\\1\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}3b_1-b_2\\0\\\frac{1}{3}(b_2-2b_1)\\0\end{bmatrix}. \qquad (5)$$

与齐次情况下的解(3)相比较，这里加上了向量 $(3b_1-b_2, 0, \frac{1}{3}(b_2-2b_1), 0)$。该向量是 $Ax=b$ 的特解。$Ax=b$ 的通解 x 是 $Ax=b$ 的一个特解与 $Ax=0$ 的通解之和。几何上，这些解又是在四维空间的一个平面上，但是它们不构成子空间，因为这个平面不通过原点。$b\neq 0$ 时，$x=0$ 不是 $Ax=b$ 的解。该平面与前面的化零空间平行，但不重合。它沿着特解向量移动了一段。齐次方程组 $Ax=0$ 的解构成子空间，非齐次方程组 $Ax=b$ 的解不构成子空间。如果 $Ax=b$，$Ax'=b$，那么这两个解的和 x'' 将满足 $Ax''=2b$。

注意，我们的特解是所有解所成平面上的一个点。该平面上任何另外的点也可以作为特解。我们的特解对应于自由变量的特殊值 $v=0$，$y=0$。

现将Gauss消去法用于长方阵所得结论总结如下：

2D 假定$m \times n$矩阵A已经通过初等运算和行交换化成了阶梯阵U，又假定有r个非零主元，U最后的$m-r$行为零，那么对应于有主元的列将有r个基本变量，对应于没有主元的列，将有$n-r$个自由变量。$Ax=0$的解所构成的化零空间有作为独立参数的$n-r$个自由变量。如果$r=n$，那就没有自由变量，化零空间就只包含$x=0$。

当且仅当$r=m$时$Ax=b$才对任何b都有解。此时主元个数为m，U没有为零的行，可以用反向代入解$Ux=c$。$r<m$时，U有$m-r$个为零的行，此时为使$Ax=b$有解，b应受到$m-r$个约束。这$m-r$个约束由$Ux=c$的最后$m-r$行给出。如果有一个特解，那么$Ax=b$的任何一个解都是这个特解与A的化零空间中一个向量的和。

数r叫做矩阵A的秩。

练习2.2.2 造一个未知数的个数多于方程的个数，但无解的最小方程组。

练习2.2.3 求

$$A=\begin{bmatrix} 1 & 2 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

的分解式LU。决定基本变量和自由变量，求出$Ax=0$的通解，并将它写成类似于(3)的形式。问A的秩是几？

练习2.2.4 求矩阵

$$A=\begin{bmatrix} 0 & 1 & 4 & 0 \\ 0 & 2 & 8 & 0 \end{bmatrix}$$

的阶梯阵U，基本变量，自由变量和$Ax=0$的通解。然后对$Ax=b$（b的分量为b_1，b_2）应用消去法，求出$Ax=b$相容（有解）的条件和(5)形式的通解。又A的秩是几？

练习2.2.5 将矩阵换为前一题的转置矩阵

$$A=\begin{pmatrix}0 & 0\\ 1 & 2\\ 4 & 8\\ 0 & 0\end{pmatrix},$$

将右端换为b_1，b_2，b_3，b_4，再做前一题。

练习2.2.6 求

$$\begin{bmatrix}1 & 2 & 2\\ 2 & 4 & 5\end{bmatrix}\begin{bmatrix}u\\ v\\ w\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1\\ 4\end{bmatrix}$$

的通解，并照(5)那样把它写成$Ax=b$的特解与$Ax=0$的通解之和。

练习2.2.7 根据将第三个方程变为$0=0$（消去法完成之后）所加在b上的约束，写出

$$\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\\ 2 & 3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}u\\ v\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}b_1\\ b_2\\ b_3\end{bmatrix}$$

的有解右端b的集合。问秩是几？

练习2.2.8 求出c的值，使得下面的方程组有解

$$u+v+2w=2$$
$$2u+3v-w=5$$
$$3u+4v+w=c$$

注．在很多教科书中，消去过程并不停止于求出U，而是将矩阵化为更简阶梯阵。更简指的是两点，一点是用主元除主元所在行，使主元为$+1$。另一点是将主元正上方的元素也化为零。对本节中的A，更简阶梯阵为

$$\begin{bmatrix}1 & 3 & 0 & 1\\ 0 & 0 & 1 & \frac{1}{3}\\ 0 & 0 & 0 & 0\end{bmatrix}.$$

非奇异矩阵的更简阶梯阵为单位矩阵I。最简阶梯阵实际上是用

Gauss-Jordan法计算出来的。Gauss-Jordan法实际在计算机上使用起来，运算量太大。但最简阶梯阵作为A的一种“标准型”，它确实有着某种理论上的重要性。不管初等运算如何选择(包括行交换和行除法)，A最终的最简阶梯阵总是相同的。

§2.3 线性无关、基底和维数

数m和n标明了线性方程组的大小。上一节的3×4矩阵有三行四列，但第三行实际上是前两行的线性组合。消去过程变第三行为零行，它对齐次问题$Ax=0$不起作用。第四列也不独立。第二和第四列都是第一、第三两列的线性组合，因而列空间退化为二维空间。

2D中出现的秩r是一个重要的数。在那里是用纯计算的方式引进的。它是正向消去过程所得非零主元的个数，等价于正向消去所得矩阵U中非零行的行数。计算机可按此定义将秩计算出来。秩有着简单而直观的意义，它是矩阵A真正独立的行的行数。下面我们给出秩以及与秩有关的另外几个量从理论上而不是计算上的定义。

先定义线性无关。给定一组向量v_1，…，v_k，我们考察它们的线性组合$c_1v_1+c_2v_2+\cdots+c_kv_k$。权$c$都为零的平凡组合显然为零$0v_1+\cdots+0v_k=0$。问题在于是不是有另外的组合也为零。

2E 如果向量v_1，…，v_k的所有非平凡组合都不为零，也即，只在c_1，…，c_k都为零时

$$c_1v_1+\cdots+c_kv_k=0 \tag{6}$$

才成立，则v_1，…，v_k线性无关。反之，如果有不全为零的c_1,…，v_k使(6)成立；则称v_1，…，v_k线性相关。此时v_1，…，v_k中至少有一个可以表示成其余向量的组合。

例1 一组向量中只要有一个为零，这组向量就线性相关。设v_1为零，我们取$c_1=3$，取其余的c_i都为零，得到的就是一个为零

的非平凡组合。

例 2 矩阵

$$A=\begin{bmatrix}1 & 3 & 3 & 2\\ 2 & 6 & 9 & 5\\ -1 & -3 & 3 & 0\end{bmatrix}$$

的行线性相关。记行向量为 v_1，v_2，v_3，则 $5v_1-2v_2+v_3=0$（上一节对以该 A 为系数矩阵的方程组进行消去时，得到的(4)式，其右端第三个分量正是这一组合。在那里，该组合为零，方程组 $Ux=c$ 有解，否则无解）。

例 3 $n\times n$ 单位矩阵

$$I=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0 & \cdot\\ 0 & 1 & 0 & \cdot\\ 0 & 0 & \cdot & 0\\ \cdot & \cdot & 0 & 1\end{bmatrix}$$

的行线性无关。我们用专门的符号 e_1，…，e_n 来记这些特殊的向量，它们是坐标方向上的单位向量

$$e_1=(1,0,\cdots,0),\cdots,\ e_n=(0,0,\cdots,1) \qquad (7)$$

证明无关常用的方法是：先假定一个线性组合为零，再证明假定的组合中权 c_i 都必须为零。本例中我们有

$$c_1e_1+\cdots+c_ne_n=(c_1,c_2,\cdots,c_n)$$

假定该组合为零向量，显然 c_i 都必须为零。因为没有非平凡组合为零，所以坐标向量 e_1，…，e_n 是无关的。

例 4 设 U 是一个 $n\times n$ 的上三角阵，其对角线上的元素（主元）全都不为零，则 U 的行线性无关。我们用例 3 的方法进行证明：假定 U 的行的组合为零，即 $c_1v_1+\cdots+c_nv_n=0$。由题设知 v_i 的第一个分量中只有 v_{11} 不为零，因而 $c_1v_1+\cdots+c_nv_n=0$ 的第一个分量为 $c_1v_{11}=0$。v_{11} 不为零，故必 $c_1=0$。$c_1v_1+\cdots+c_nv_n=0$ 的第二个分量为 $c_1v_{12}+c_2v_{22}=0$。刚刚证明了 $c_1=0$，题给 v_{22} 不为零，故必 $c_2=0$。类推下去，证得 c_i 全都为零。也即 U 的行的

组合只在权c_i全都为零时才为零。证得U的行线性无关。

同样的方法应用于U的列，因为主元全都不为零所以矩阵U的列线性无关。进一步，该推理方法亦可应用于任何一个阶梯阵中主元不为零的各行（列）。从而得如下结论：

2F 阶梯阵U的r个非零行线性无关，含有非零主元的列也线性无关。

我们强调指出，线性无关的定义与坐标无关。给定n维空间中k个点，从原点到这k个点的向量能否组合成一个零向量，这与坐标轴的位置全无关系。坐标轴旋转将改变点的坐标，但对相关与否不产生影响。

另一方面，给定了任何一组向量v_1，…，v_k，它们的相关与否显然是要通过计算来决定的。我们讨论的对象是$c_1v_1+\cdots+c_kv_k$。将v_1，…，v_k写成以v_i为第i列的矩阵A，记权向量$(c_1, \cdots, c_k)$为c，则

$$Ac=\begin{bmatrix} | & | & & | \\ v_1 & v_2 & \cdots & v_k \\ | & | & & | \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_k \end{bmatrix}=c_1v_1+\cdots+c_kv_k.$$

向量v_1，…，v_k当且仅当$Ac=0$有非平凡解时是相关的。$Ac=0$是否有非平凡解用消去法来决定。当A的秩为k时，没有自由变量，也就没有化零空间(除了$c=0$)，向量v_1，…，v_k是线性无关的。A的秩小于k时，至少有一个自由变量，让它取非零值，此时列向量是线性相关的。

有一种特别重要的情形，假定向量的分量个数为m，且$k>m$。此时$m\times k$矩阵A的秩不可能为k，非零主元的个数绝对不能超过矩阵的行数。秩一定比k小，从而未知数个数多于方程个数的齐次方程组$Ac=0$恒有非零解$c\neq 0$。

2G　$k>m$时，R^m中的k个向量必定相关。

请读者比较一下，2G和2C实质上是一回事。

例5 考虑

$$A=\begin{bmatrix}1 & 2 & 1\\ 1 & 3 & 2\end{bmatrix}$$

的三列，R^2中不能有三个线性无关向量。我们来求列的为零的组合，解$Ac=0$

$$A\rightarrow U=\begin{bmatrix}1 & 2 & 1\\ 0 & 1 & 1\end{bmatrix}.$$

令自由变量c_3为1，对$Uc=0$进行反向代入，得$c_2=-1$，$c_1=1$。由求得的c_1，c_2，c_3知，第一列减第二列，再加上第三列得零。

练习2.3.1 用求c_1，c_2，c_2，c_4的办法判定下列向量是否线性无关

$$v_1=\begin{bmatrix}1\\1\\0\\0\end{bmatrix},\quad v_2=\begin{bmatrix}1\\0\\1\\0\end{bmatrix},\quad v_3=\begin{bmatrix}0\\0\\1\\1\end{bmatrix},\quad v_4=\begin{bmatrix}0\\1\\0\\1\end{bmatrix}$$

练习2.3.2 例5中A的列向量线性相关，问它的行向量是否也线性相关？

练习2.3.3 试证

$$T=\begin{bmatrix}a & b & c\\ 0 & d & e\\ 0 & 0 & f\end{bmatrix}$$

的对角元素有一个为零，它的行就线性相关。

练习2.3.4 如果v_1，v_2，v_3线性无关，问$w_1=v_1+v_2$，$w_2=v_1+v_3$，$w_3=v_2+v_3$是否也线性无关？

本章开始部分有这样的话，A的列空间由A的列张成。下面我们给“张成”这两字正式下定义。

2H 如果向量空间V由向量w_1，…，w_l的线性组合构成，我们

就说这些向量张成这一空间。换句话说，w_1，…，w_l张成 V 表示 V 中的每一个向量 v 都可以表示成w_1，…，w_l的线性组合

$$v = c_1 w_1 + \cdots + c_l w_l, \quad c_i\text{为某一组系数} \tag{8}$$

对应于同一个向量 v 系数c_i可以不只一组；系数可以不唯一，这是因为母集合可以很大，它甚至可以包含零向量。

例6 向量$w_1=(1, 0, 0)$，$w_2=(0, 1, 0)$，$w_3=(-2, 0, 0)$张成三维空间中一张平面（x-y平面）。w_1，w_2也张成这同一张平面，而w_1，w_3则张成一条直线。

例7 A为$m\times n$矩阵。A的列空间由A的列张成，它是 m 维空间R^m的子空间（当然，它可以是整个空间R^m）。A的行空间，定义类似。A的行空间是R^n的子空间，是由A的行张成的（我们把行看成是R^n的成员，虽然它的分量是横着写的）。如果$m=n$，那么行空间和列空间就都是R^n的子空间，它们甚至可以是同一个空间。

例8 R^n中坐标向量

$$e_1=(1, 0, \cdots, 0), \cdots, e_n=(0, \cdots, 0, 1)$$

生成R^n。为证明这一结论，只须指出怎样把任何一个向量$x=(x_1, x_2, \cdots, x_n)$写成$e_i$的组合。事实上，分量$x_i$本身就是组合的系数

$$x=x_1e_1+x_2e_2+\cdots+x_ne_n$$

本例中，向量组e_1，…，e_n是线性无关的。粗略地说，这组向量中没有多余的。例5的矩阵中有一列是多余的，它不给列空间增加东西。本例中，母组是最小的。去掉任何一个e_i，剩下的将张不成R^n。这样的向量组称为基底。

2I 向量空间的基底是具有下列两条性质的向量组

(1)它线性无关。

(2)它张成向量空间。

这两条性质作为总体，对向量空间理论是基本的基本。它意味着基底所张成的空间中，每一个向量 v 都可以唯一地表示成基底的组合，$v=a_1v_1+\cdots+a_kv_k$（空间由基底张成，当然每一个向量都可以表示成基底的组合；如果v还有另一种表示$v=b_1v_1+\cdots+b_kv_k$，

那么，相减得 $0=\Sigma(a_i-b_i)v_i$。由基底线性无关得(a_i-b_i)都为零。这证明了向量表示成基底组合时，权是唯一的）。

例9 考虑通常的x-y平面（图2.3），也即R^2。单个向量v_1是线性无关的，但它张不成R^2。三个向量v_1，v_2，v_3当然可张成R^2，但它们不是线性无关的。这三个向量中的任何两个都是R^2的基底。基底的两条性质它们都具备，它们既线性无关又张成R^2。我们指出，向量空间的基底不唯一。

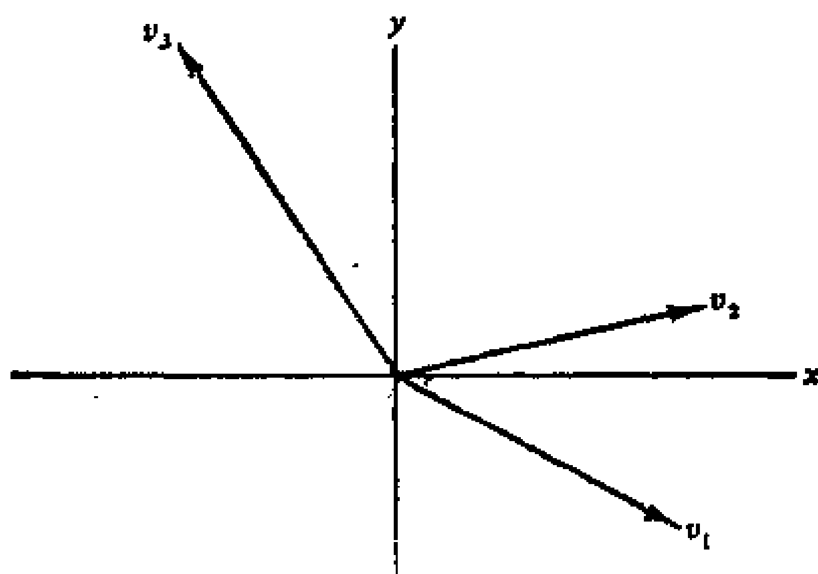


图 2.3 二维空间R^2的母组和基底

例10 考虑例2中A所对应的阶梯阵

$$U=\begin{bmatrix}1&3&3&2\\0&0&3&1\\0&0&0&0\end{bmatrix}.$$

U的四列当然张成U的列空间，但是这四列不是线性无关的。基底的取法有多种可能。我们建议取非零主元所在列（本例是对应于基本变量的第一、第三两列）为列空间的基底。在2F中我们指出了，这种列是线性无关的，易知它们张成列空间。事实上，U的列空间恰恰是R^3中的$x-y$平面。

练习2.3.5 用语言或在x-y平面上作图表示出$A=\begin{bmatrix}1&2\\3&6\end{bmatrix}$的

列空间和行空间。并写出它们的基底。

练习2.3.6 根据主元求出

$$U=\begin{bmatrix} 0 & 1 & 4 & 3 \\ 0 & 0 & 2 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

的列空间的基底。并将非基底列表示成基底列的线性组合。再求出U的行空间（它是R^4的另外一个子空间）的基底。

练习2.3.7 假定我们把每一个2×2矩阵都看成一个“向量”。虽然它们并不是通常意义下的向量，但我们也有着矩阵加法和数乘矩阵的规则，而且二阶矩阵对这两种运算封闭。试求出该向量空间的一个基底。又问由所有阶梯阵U张成的子空间是什么样的？

练习2.3.8 R^3中前两个分量相等的向量构成一个子空间。试求出该子空间的两个不同的基底。

练习2.3.9 试举出下面这段话的一个反例：如果$v_1,\cdots,v_4$是向量空间R^4的一个基底，又如果W是一个子空间，那么$v_1,\cdots,v_4$的某个子集构成W的基底。

尽管基底无穷多，不唯一，但一个向量空间的所有基底却有着共同点。这共同点是向量空间的本质属性。

2J 向量空间V的任何两个基底所含向量个数都相等。基底的向量个数，表示V的“自由度”的个数，称为V的维数。

当然同一空间的基底所含向量个数相等，这一事实需要证明。首先，我们要求读者回过头去看看举过的几个例子，看看它们的维数。图2.3中的x-y平面，它的每一个基底都含有两个向量，维数是2。更一般地，R^n的维数是n，坐标向量e_i是R^n的用起来最方便的基底。例10中，U的行空间是R^4的二维子空间，列空间是R^3的二维子空间。零矩阵$A=0$有些特殊，它的列空间和行空间都只含有一个零向量，这两个零向量分别属于R^m和R^n。为方便起见，规定零维

空间的基底是空集。

关于维数的定理2J等价于如下定理：

2K　假定v_1，…，v_m和w_1，…，w_n是同一向量空间V的两个基底，则必$m=n$。

证明　证明的方法是，假定$m \neq n$，譬如说$m<n$，从这个假定导出矛盾，从而达到证明$m=n$。由于v_1，…，v_m是基底，它应该张成空间V，因而每一个w_j都可以写成v_1，…，v_m的组合

$$w_j = a_{1j}v_1 + \cdots + a_{mj}v_m = \sum_{i=1}^{m} a_{ij}v_i.$$

当然，我们不知道权a_{ij}，但我们还是可以考察w_j的组合

$$c_1w_1 + \cdots + c_nw_n = \sum_{j=1}^{n} c_j\Big[\sum_{i=1}^{m} a_{ij}v_i\Big]$$

$$= \sum_{i=1}^{m} v_i\Big[\sum_{j=1}^{n} a_{ij}c_j\Big]. \qquad (9)$$

该"二重合"的这一改换次序，相当于求矩阵全体元素之和时，是将先按行加再按列加，改成了先按列加再按行加。

考虑方程组$\Sigma a_{ij}c_j=0$，$i=1$，…，m。这是一个$m \times n$齐次方程组，我们假定了$m<n$，因而它有非平凡解$c=(c_1, \cdots, c_n)$。将$\Sigma a_{ij}c_j=0$代入(9)，得到以该非平凡解为权的组合

$$c_1w_1 + \cdots + c_nw_n = 0.$$

这表明向量w_j不是线性无关的，与题给w_j线性无关矛盾。这就是说，我们所做的$m<n$的假定是错的。这就证明了$m=n$。

这里的证明方法，与证明2G，R^m中任何$m+1$个向量必定线性相关，所用的方法是一样的。事实上，更一般的结果是：k维子空间中，个数多于k的向量组必定线性相关，个数少于k的向量组必定生不成k维子空间。

另外有"对偶"定理，我们只列出其中的一个。它使得我们可以把一组向量扩大或缩小为一个基底。

2L V中任何一个线性无关组，都可以加上必要的向量使它成为基底。

V中任何一个母组，都可以去掉多余的向量使它成为基底。

练习2.3.10 假定R^3中的向量x，y，z满足$x+y+z=0$。问x、y、z所张成的子空间的可能的维数是什么？对每一种可能举出一组x，y，z。

练习2.3.11 $A=\begin{bmatrix}1 & 2 & 1\\ 0 & 0 & 4\end{bmatrix}$，试将$A$的行集合扩大为$R^3$的基底，将$A$的列集合缩小为$R^2$的基底。

练习2.3.12 已知V的维数为k，试证（可用对偶定理2L）

(i) V中任何k个无关向量都构成一个基底。

(ii) 张成V的任何k个向量都构成一个基底。

这表明，向量个数等于空间维数时，基底的两条性质等价。

练习2.3.13 求3×3对称矩阵空间的维数和一个基底。

练习2.3.14 试证，如果V和W是R^6的两个三维子空间，则V和W必定有共同的非零向量。提示：考虑这两个空间的基底，共有六个向量。

关于线性代数用语的一点注意："矩阵的基底"，"行空间的秩"，"基底的维数"，这三句话我们都没使用过。它们是没有意义的。我们用过这样的话，行空间的维数等于矩阵的秩。

§2.4 四个基本子空间

前一节讲定义，没讲构造方法，讲了什么是基底，没讲怎样求出基底。现在，我们从子空间的描述出发，讲基底的求法。

描述子空间的方式通常有两种。一种是给出一组向量，由它张成子空间。对行空间和列空间都是这样描述的。另一种是给出子空间所应受的约束。此时告诉我们的，不是哪些向量属于子空间，而是子空间中向量所应满足的条件，例如化零空间就是由满足$Ax=0$的向

量组成的，方程组$Ax=0$的每一个方程就是一个约束。在第一种方式中可以有多余的行或列，在第二种方式中可以有多余的约束。在两种方式之下都不能直接写出基底，都要求有进一步的具体方法。

读者可能想得到，这具体方法是：根据消去过程中产生的L和U（以及P）来求与A有关的各子空间的基底。讲过具体方法之后，尽管那要使本节篇幅加长，我们还是要考察两种特殊的情形：

(i)秩$r=1$的情形，此时行空间和列空间都特别简单。

(ii)$r=n$或$r=m$或$r=m=n$，也即矩阵有左逆矩阵B，或有右逆矩阵C，或有双边逆阵A^{-1}的情形。

下面我们对四个基本子空间逐个进行讨论，这四个子空间都与U有关系，都容易求得。我们的问题是找出他们与原矩阵A的关系。

1. A的行空间　对A进行消去得到阶梯阵U，U的行空间可以直接写出：维数等于秩r，基底是U的r个非零行。幸运的是，关于A的行空间也同样的简单。

2M　A的行空间，U的行空间，它们的维数同为r，基底相同，因为这两个行空间相同。

两个行空间所以相同，是因为基本运算不改变行空间。新矩阵U的每一行都是原矩阵A的行的组合。由此得知，U的行空间包含在A的行空间之中；又得到U的每一步都可以用另外的基本运算复原回去，因而A的行空间包含在U的行空间之中。

A的m行张成行空间。根据2L，我们从A的m行中去掉$m-r$行来得到行空间的基底。但应该去掉哪些行？这往往是难以决定的。因此，我们没有那样做，而是取U的非零行作A的行空间的基底，这要容易些。

这一推理也可解释前面关于秩的定义。前面定义秩r为U的非零主元(或非零行)的个数，并未考虑不同的消去运算可以产生不同的阶梯阵U。现在我们知道了，这不同的每一个阶梯阵的非零行都可以作为A的行空间的基底。所有这些基底的成员个数都相同。因此，我们可以重新定义r：秩是行空间的维数。

2. A的化零空间　消去法本来的目的是，把线性方程组化简，保持解不变。但容易求出，方程组$Ax=0$被化成$Ux=0$，而且这一过程可以还原。由此可知，A的化零空间与U的化零空间相同。m个方程$Ax=0$给予化零空间的m个约束中只有r个是独立的。A的任何r个线性无关行，或者更确切的，U的r个非零行就是这r个独立的约束。U的r个非零行为r个独立的约束这一点，提供我们一个求化零空间基底的方法。

2N　A的化零空间(记为$\mathcal{N}(A)$)的维数是$n-r$，它的基底可以从$Ux=0$求得。$Ux=0$中对应于不含非零主元的列有$n-r$个自由变量。求法是依次让一个自由变量为1，其余的自由变量都为零，用反向代入解$Ux=0$，得到的$n-r$个向量就是$\mathcal{N}(A)$的基底。

在2B后面的例子中，自由变量是v和y，基底是

$$v=1,\ y=0 \quad x_1=\begin{pmatrix}-3\\1\\0\\0\end{pmatrix};\quad v=0,\ y=1 \quad x_2=\begin{pmatrix}-1\\0\\-\frac{1}{3}\\1\end{pmatrix}.$$

易知在本例中以及在一般情况下，这样得到的向量x_i都是线性无关的。任何一个组合$c_1x_1+c_2x_2$的分量v都为c_1，分量y都为c_2，因而只在$c_1=c_2=0$时，才有$c_1x_1+c_2x_2=0$。这两个向量张成化零空间，组合vx_1+yx_2是通解。这样$n-r=4-2$个向量x_i就是基底。

A的化零空间也称为A的核。化零空间的维数简称零度，记零度为$\nu(A)$，它与A的秩的关系是

$$\nu(A)=\mathcal{N}(A)\text{的维数}=n-r。$$

3. A的列空间　记A的列空间为$\mathcal{R}(A)$，也称它为A的值域。通常的函数f涉及定义，定义域，值域。值域是函数值$f(x)$的全体，这里的x都在定义域中。在向量情况下，函数$f(x)=Ax$的定义域是R^n的所有向量，值域是所有可能的向量Ax(换句话说，

是所有使$Ax=b$有解的b）。我们知道，这也就是A的列的所有可能的组合，值域也就是列空间。我们采用列空间这一术语，但也使用记号$\mathscr{R}(A)$*。

我们的问题是求$\mathscr{R}(A)$的基底和维数。自然的一个想法是，让A的列成为另一个矩阵的行，那么我们要考虑的就又是一个行空间了。这另一个矩阵是A的转置矩阵A^T。由于A的列是A^T的行，A^T就是一个$n\times m$矩阵。转置把A的每一个元素都变到了它自己的"镜像"位置上（以主对角线为镜面），$(A^T)_{ij}=A_{ji}$。同时，A的行就成了A^T的列，由此得到A的行空间的另一个有用的记号$\mathscr{R}(A^T)$。即把A的行空间记为A^T的列空间。这样行空间就成了列空间。

当然，我们可以把A^T化为行梯阵，从而事实上对A的列空间进行考察。但我们不这样做。转置矩阵有着许多应用，但不这样用。为避免引进A^T的秩，避免构造新的阶梯阵。我们希望用A的m，n和r来表示列空间的维数。

须强调指出，A的列空间与U的列空间是不相同的。消去过程保持行空间和化零空间不变，但不保持列空间不变，比较一下

$$A=\begin{bmatrix}1&3&3&2\\2&6&9&5\\-1&-3&3&0\end{bmatrix}\quad 和 \quad U=\begin{bmatrix}1&3&3&2\\0&0&3&1\\0&0&0&0\end{bmatrix}$$

的列，可以清楚地看出它们的不同，然而它们的列空间的基底之间却有着可助我们利用的关系，这关系是，它们构成基底的列所处位置相同。例如U的列空间的基底由U的第一、三两列组成，A的列空间的基底也由A的第一、三两列组成。所以有这样的关系，这原因是，方程组$Ux=0$和$Ax=0$等价，有着相同的解。根据矩阵乘法，对每一个解，$Ax=0$，$Ux=0$都是自己的列的以x的分量为权的一个线性关系。因此，如果A的某几列线性无关，那么U的对

*书中用小写字母r代表秩，用花写字母$\mathscr{R}$代表列空间。

应的列也必线性无关，反之亦然*，在我们的A和U中，最后一列都等于第一列加上第三列的三分之一，第二列都等于第一列的三倍。

这样，我们把求$\mathscr{R}(A)$的基底转化成了求U的列空间的基底。2F讲过了，U的列空间的基底由U的含有非零主元的列组成。我们把这一结果转到A上去，就得到

20 列空间$\mathscr{R}(A)$的维数等于A的秩，等于A的行空间的维数，也即无关列的个数与无关行的个数相等。$\mathscr{R}(A)$的基底由A的r个列组成，这r个列对应于U中含有非零主元的列。

行空间、列空间维数相同，这是线性代数中最重要的定理之一。常常把它简写为“行的秩=列的秩”。对于任意一个10×12的矩阵，上述结果是不十分明显的。

为再一次说明U的列空间的维数为r，我们考虑一种$r=3$的情形，阶梯阵有三个线性无关行

$$U=\begin{bmatrix} d_1 & * & * & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & d_2 & * & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

我们断言它有三个无关列，并且只有三个，就是含有非零主元的三列。因此，如果我们能够证明这三个基本列（第一、四、六列）线性无关，那这三列就是U（不是A）的列空间的基底。假定这三列的某一个组合为零

$$c_1\begin{bmatrix} d_1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}+c_2\begin{bmatrix} * \\ d_2 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}+c_3\begin{bmatrix} * \\ * \\ d_3 \\ 0 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

---

* 我认为这是本书到现在为止最巧妙的论证。由它导出的结论20也是本书到现在为止最巧妙最重要的。

自下而上，首先由$d_3 \neq 0$得c_3必为零，再由$d_2 \neq 0$得c_2必为零，最后得$c_1 = 0$。这就证明了这三列线性无关，也即它们构成基底。由于当且仅当$Ux = 0$时才有$Ax = 0$，我们应该取A（尽管在本例中尚不知道矩阵A）的第一、四、六列为$\mathscr{R}(A)$的基底。

下面我们来讲第四个子空间。虽然我不曾提到它，但由前面的三个子空间$\mathscr{R}(A^T)$，$\mathscr{N}(A)$，$\mathscr{R}(A)$，我们不难想到这第四个子空间为$\mathscr{N}(A^T)$。

4. A^T的化零空间　它是R^m的子空间，由满足$A^Ty=0$的向量y组成。也即由A的列组成，这些列以$y_1\cdots$，y_m为权组合起来成为零列。由于A^T的列是A的行，我们可以变$A^Ty=0$为行向量的方程

$$y^TA=[y_1\cdots y_m]\begin{bmatrix} \\ A \\ \\ \end{bmatrix}=[0\cdots0]。$$

有时称这样的行向量y^T为A的左化零向量，A的行以y_1，…，y_m为权组合起来成为零行。

$\mathscr{N}(A^T)$的维数容易求得。任何一个矩阵，基本变量的个数加上自由变量的个数都必定等于总列数。换句话说

$$\begin{aligned}\text{秩}+\text{零度}&=\text{列空间的维数}+\text{化零空间的维数}\\&=\text{列数}。\end{aligned} \tag{10}$$

这一规则也适用于A^T，它有m列。由行的秩=列的秩$=r$，我们得到

$$r+\mathscr{N}(A^T)\text{的维数}=m。 \tag{11}$$

2P　左化零空间$\mathscr{N}(A^T)$的维数为$m-r$。

为了求得基底，我们考虑$PA=LU$或$L^{-1}PA=U$。U的最后$m-r$行为零，因此$L^{-1}P$的最后$m-r$行就是左化零空间的基底，这些行乘上A都得零。

四个空间的维数我们都知道了。现归总列表如下：

线性代数基本定理（上）

1．$\mathscr{R}(A^T)=A$的行空间，维数为r

2. $\mathcal{N}(A)=A$的化零空间，维数为$n-r$

3. $\mathcal{R}(A)=A$的列空间，维数为 r

4. $\mathcal{N}(A^T)=A$的左化零空间，维数为$m-r$。

练习2.4.1 如果$m=n$，则A的化零空间等于左化零空间。问这一结论成立否？

练习2.4.2 试求出习题2.2.4中矩阵

$$A=\begin{bmatrix} 0 & 1 & 4 & 0 \\ 0 & 2 & 8 & 0 \end{bmatrix}$$

的四种子空间的维数，并构造出它们的基底。

练习2.4.3 试求出下面矩阵的四种子空间的维数和基底

$$A=\begin{bmatrix} 1 & 2 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

练习2.4.4 试描述下面矩阵的四种子空间

$$A=\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

练习2.4.5 试证，如果两个矩阵的积为零矩阵，$AB=0$，则B的列空间包含在A的化零空间之中。

练习2.4.6 试解释，为什么当且仅当A的秩等于A'的秩的时候$Ax=b$才可解，A'是把b加到A上所成的矩阵。提示：秩是列空间的维数，方程组当且仅当b在$\mathcal{R}(A)$中时才可解。

秩为1的矩阵

给了一个复杂的东西，怎样证明它是由一些简单的东西组成的，这是数学上一个基本课题。我们看到的下三角矩阵L是若干基本矩阵的乘积，就是一个这样的例子。现在我们把秩的大小作为简单程度的标准，并引进秩为1，即$r=1$的这样一类矩阵。矩阵

$$A=\begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 4 & 2 & 2 \\ 8 & 4 & 4 \\ -2 & -1 & -1 \end{pmatrix}$$

就是这类矩阵中的一个，它的每一行都是第一行的倍数，因而它的行空间的维数为1。事实上，我们可以将该矩阵写成一个列向量与一个行向量的积

$$A=\begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 4 & 2 & 2 \\ 8 & 4 & 4 \\ -2 & -1 & -1 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 4 \\ -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

4×1 矩阵与 1×3 矩阵的积是 4×3 矩阵，积的秩是1。我们指出，该矩阵的列也都是一个列向量的倍数，列空间的维数为1，为一条直线。

任何一个秩为1的矩阵 A 都可以分解为 $A=uv^T$ 这样一种简单形式，即行都是同一个行向量 v^T 的倍数，列都是同一个列向量 u 的倍数。

最后一节我们讲述怎样把一个秩为 r 的矩阵分解成 r 个秩为1的矩阵的和。

练习2.4.7 a，b，c 已给，且 $a\neq 0$。试求 d，使

$$A=\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$$

的秩为1。在求得的 d 之下，将 A 分解为 uv^T。

练习2.4.8 试求出秩为1矩阵

$$A=\begin{bmatrix} 2 & -2 \\ 4 & -4 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad 和 \quad B=\begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 3 & 3 & 6 \end{bmatrix}$$

的积 AB。将 A 和 B 分别写成 uv^T 和 wz^T，并验证积 AB 是 uz^T 的若干

倍，这倍数是内积v^Tw。

练习2.4.9 在x-y平面上画出前题矩阵A的行空间和化零空间。

逆矩阵的存在

从§1.5我们已经知道，如果A既有左逆矩阵（$BA=I$），又有右逆矩阵（$AC=I$），则这两个逆矩阵必定相等，$B=B(AC)=(BA)C=C$。现在可以根据矩阵的秩容易地判断出一个矩阵有无左、右逆矩阵。粗略地说，一个矩阵，当且仅当它的秩为可能的最大时，才有逆矩阵。

秩r恒满足$r\leqslant m$，$r\leqslant n$。因为$m\times n$矩阵的无关行的个数不能多于m，无关列的个数不能多于n。我们要证明，如果$r=m$，则有右逆矩阵；如果$r=n$，则有左逆矩阵。在前一种情况下$Ax=b$必有解，在后一种情况下，解如果存在，则必唯一。只在方阵的情况下，才可以既有$r=m$，又有$r=n$。因而也只在方阵的情况下，$Ax=b$的解才能既存在又唯一。

2Q 存在性 当且仅当A的列生成R^m，也即$r=m$时，组$Ax=b$才对每一个b至少有一个解。此时存在一个$n\times m$右逆矩阵C，使得$AC=I_m$，I_m为m阶单位矩阵。只在$m\leqslant n$时，才可能有这种情况。

唯一性 当且仅当A的列线性无关，也即$r=n$时，组$Ax=b$才对每一个b至多有一个解。此时存在一个$n\times m$左逆矩阵B，使得$BA=I_n$，I_n为n阶单位矩阵。只在$m\geqslant n$时，才可能有这种情况。

在前一种情况下，一个可能的解是$x=Cb$，因为对$x=Cb$我们有$Ax=ACb=b$。但是，如果A有另外的右逆矩阵，那就将有另外的解。

在后一种情况下，如果$Ax=b$有解，这个解必须是$x=BAx=Bb$。但是可以无解*。

*) 在“唯一”的情况下，解的个数是0或1；在“存在”的情况下，解的个数是1或∞。

例　考虑秩为2的2×3矩阵

$$A=\begin{bmatrix}4&0&0\\0&5&0\end{bmatrix}$$

由于$r=m=2$，定理保证有右逆阵C存在，使得

$$AC=\begin{bmatrix}4&0&0\\0&5&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}C_{11}&C_{12}\\C_{21}&C_{22}\\C_{31}&C_{32}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1&0\\0&1\end{bmatrix}.$$

事实上，有很多这样的右逆矩阵，因为C的最后一行完全任意

$$C=\begin{pmatrix}\frac{1}{4}&0\\0&\frac{1}{5}\\C_{31}&C_{32}\end{pmatrix}.$$

这是存在但不唯一的例子，

作为另一方面的例子，我们考虑A的转置矩阵．A^T是3×2矩阵，秩也是2。它有无穷多个左逆矩阵

$$BA^T=\begin{bmatrix}b_{11}&b_{12}&b_{13}\\b_{21}&b_{22}&b_{23}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}4&0\\0&5\\0&0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1&0\\0&1\end{bmatrix}.$$

现在，完全可以任意的是B的最后一列，事实上，B也是C的转置。

这个例子启示我们关于构造B，C和关于证明2Q的一般方法。下面我们对"存在"和"唯一"两种情况分别进行讨论。

(1)存在　已知A的列张成R^m，从而秩（列空间的维数）为m。因此，每一个向量b都可以表示成A的列的线性组合，当然，坐标向量e_1，…，e_m也可以作为b。这样，至少对每一个$i=1,\cdots,m$，我们都可以求得$Ax_i=e_i$的一个解x_i。用x_i作第i列的$n\times m$矩阵就是我们所要的右逆矩阵C，

$$AC=A(x_1,\ \cdots,\ x_m)=(e_1,\ \cdots,\ e_m)=I_m.$$

(2)唯一　已知A的n列线性无关，从而秩为n。因此，没有自由变量，化零空间只包含一个0。这样，如果$Ax=b$有特解，它就是唯一的解。左逆矩阵的最简单的构造方法是考虑A^T。它是一个$n\times m$矩阵，由基本定理知它的秩也为$r=n$，现在是秩等于行数。这样，我们就可以对A^T应用本定理的存在部分。从而有右逆矩阵(记为Q)存在，使得$A^TQ=I_n$。转置得$Q^TA=I_n$。Q^T就是我们所要的左逆矩阵B。

构造这两种逆矩阵，还有一个更简单的方法。把B和C写成

$$B=(A^TA)^{-1}A^T \quad 和 \quad C=A^T(AA^T)^{-1}$$

当然$BA=I$，$AC=I$，但$(A^TA)^{-1}$和$(AA^T)^{-1}$的存在并不那么明显，需有加到列空间上的条件给以保证。后面3G将证明A的秩为n时，A^TA可逆，A的秩为m时AA^T可逆。

把A看成从R^n到R^m的一个变换是很自然的。任给R^n中一个向量，A都把它变成R^m中的向量Ax、矩阵乘法规则告诉我们$A(cx+dy)=cAx+dAy$。这就是说这个变换是线性的，这是它的最重要的性质。书末附录A讲线性变换与矩阵之间的关系。在"存在"，即$r=m$时，称变换为映上的。此时，R^m中的每一个b都至少是由R^n中一个x变换而来，$Ax=b$。值域(列空间)是整个R^m。在"唯一"，即$r=n$时，变换为一对一的，每一个b至多由R^n中一个x变换而来。我们举一个非线性变换的例子。变R^1为R^1的函数$y=x^2$就不是映上的，因为$y=-4$不能由任何x变来；它也不是一对一的，因为数$y=4$既可由$x=+2$变来又可由$x=-2$变来。函数$y=x^3$就既是映上的又是一对一的。此情况下有着一个一一对应，即实数x与它的立方x^3之间的一一对应，也可以说实数y与它的立方根$y^{\frac{1}{3}}$之间的一一对应，这里第二个变换是第一个的(双向)逆变换。可逆变换等价于一一对应，既是一对一的又是映上的。

一个长方阵只能具有两条性质中的一条，不能兼有另一条，非线性函数也是如此，习题中要求读者举一个这样的例子。但是方阵就不同了。如果$m=n$，那么A在并且只在有右逆矩阵的时

候才有左逆矩阵，此时存在就意味着唯一，唯一就意味着存在。由于右逆矩阵与左逆矩阵同时存在，则必须相等，所以此时只有一个逆矩阵 $B=C=A^{-1}$。这里可逆的条件是秩为可能的最大值，$r=m=n$。换个说法：下列条件中的每一条都是n阶矩阵非奇异的充分必要条件：

(1)列张成R^n，从而对每一个b，$Ax=b$至少有一个解。

(2)列线性无关，从而$Ax=0$只有解$x=0$。

把前面讲过的和后面要讲的都考虑在内的话，这个表还可以加长。表中的条件是彼此等价的，都保证A非奇异。

(3)A的行张成R^n。

(4)行线性无关。

(5)有行交换的消去法使得主元不为零，即 $PA=LDU$，$d_i\neq 0$，$i=1$，…，n

(6)存在矩阵A^{-1}，使得$AA^{-1}=A^{-1}A=I$*

(7)A的行列式非零。

(8)零不是A的特征值。

(9)A^TA是正定的。

(10)AA^T是正定的。

这里是一种典型的应用，考虑所有$n-1$阶多项式$p(t)$。在n个给定的点t_1，…，t_n处为零的$n-1$阶多项式必为$P(t)=0$，别的$n-1$阶多项式不能有n个根，这唯一性(它意味着存在性)可陈述为：任给b_1，…，b_n都存在一个$n-1$阶插值多项式，使$P(t_i)=b_i$，$i=1$，…，n。事实上，如果$P(t)=x_1+x_2t+\cdots+x_nt^{n-1}$，则方程组$P(t_i)$写成矩阵形式为

$$\begin{bmatrix}1 & t_1 & t_1^2 & \cdots & t_1^{n-1}\\ 1 & t_2 & t_2^2 & \cdots & t_2^{n-1}\\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots\\ 1 & t_n & t_n^2 & \cdots & t_n^{n-1}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\\ \vdots\\ x_n\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}b_1\\ b_2\\ \vdots\\ b_n\end{bmatrix}$$

*)这就是说，可逆是非奇异的同义语。这两个词都只用于方阵。

系数矩阵是$n\times n$的，称它为范得蒙矩阵。我们知道，由 $Ax=0$ 只有零解$x=0$（换句话说，$P(t_i)=0$ 只在$P=0$时才有可能）得A非常奇异，则$Ax=b$恒有解，也即多项式在点t_i处取值b_i。后面我们将算出A的行列式，它不为零。

再一点是，由A非奇异，知A^T非奇异，它们的秩相同。因此，我们不仅可以对任意的b解$Ax=b$，而且可以对c解$A^Ty=c$。后一方程组来自完全不同的应用。假定我们寻求状如

$$\int_0^1 f(t)dt\approx \sum_1^n y_i f(t_i)$$

的近似数值积分公式，即用f在n个点t_i处的值$f(t_i)$来近似f的积分。仅仅根据n个点处的值来选择系数y_i，这样得到的数值公式不可能对所有的函数都适用，但可以对所有的$n-1$阶多项式$f=P$都适用。写出$f=1$，$f=t$，…，$f=t^{n-1}$的近似公式，我们有

$$\int_0^1 1\,dt=y_1+\cdots+y_n$$

$$\int_0^1 t dt=y_1t_1+\cdots+y_nt_n$$

$$\vdots$$

$$\int_0^1 t^{n-1}dt=y_1t_1^{n-1}+\cdots+y_nt_n^{n-1}.$$

用矩阵写出来为$c=A^Ty$，已证明了它可解，因而可以求得系数y_i。从另一个角度看，我们说因为$n-1$阶多项式只有$n-1$个根，所以近似积分公式存在

练习2.4.10 构造一个非线性函数$y(x)$，是一对一的，但不是映上的；再构造一个非线性函数，是映上的，但不是一对一的。

练习2.4.11 当且仅当对A^T唯一性成立时，对A存在性才成立，反之亦然。试解释，这是为什么？

练习2.4.12 $A=[1\ \ 1\ \ 0]$，试构造A和A^T的所有可能的左逆

或右逆矩阵。

§2.5 正交向量和正交子空间

本节第一步先求向量的长。在二维情况下，向量x的长$\|x\|$等于一个直角三角形的斜边长(图2.4a)。直角三角形斜边长的计算公式为$\|x\|^2=x_1^2+x_2^2$，是很久以前Pythagoras(毕达哥拉斯)给出的*。

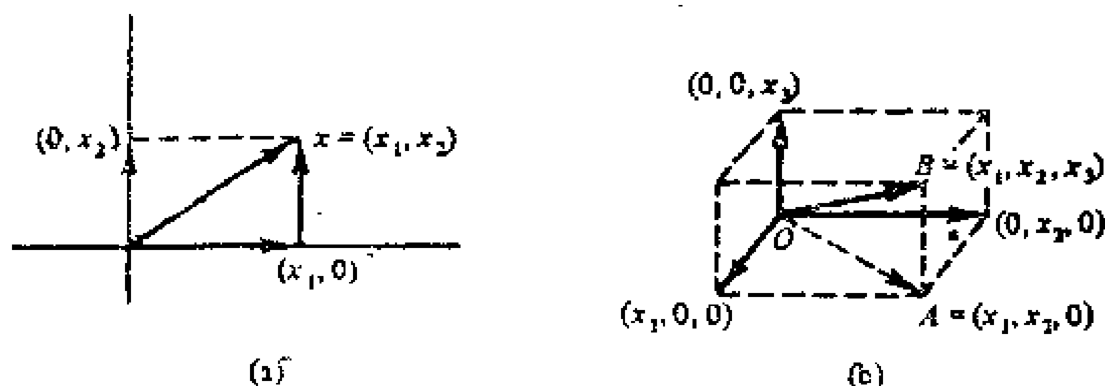


图 2.4 二维和三维向量的长

在三维情况下，向量$x=(x_1, x_2, x_3)$是一个长方体的对角线(图2.4b)。长方体对角线的长可以通过两次应用Pythagoras公式求出。先求出底面对角线$OA=(x_1, x_2, 0)$的长，得$\overline{OA}^2=x_1^2+x_2^2$。$OA$与竖棱$(0, 0, x_3)$构成直角三角形(在$OA$，$AB$所决定的平面内)$OAB$，它的斜边$OB$就是向量$x$。再用一次Pythagoras公式，得

$$\|x\|^2=\overline{OA}^2+\overline{AB}^2=x_1^2+x_2^2+x_3^2.$$

推广到n维向量$x=(x_1, \cdots, x_n)$，得

$$\|x\|^2=x_1^2+\cdots+x_n^2. \tag{12}$$

即R^n中向量x的长$\|x\|$等于其分量平方和的平方根，取正号。几何上这相当于应用了$n-1$次Pythagoras公式，每次维数增1。在一维情况下，$n=1$，向量长等于分量x_1的绝对值。

给了我们两个向量x和y(图2.5)，怎样判断它们垂直与否呢?

* 也可能是埃及人给出的，后来Pythagoras给出了证明。

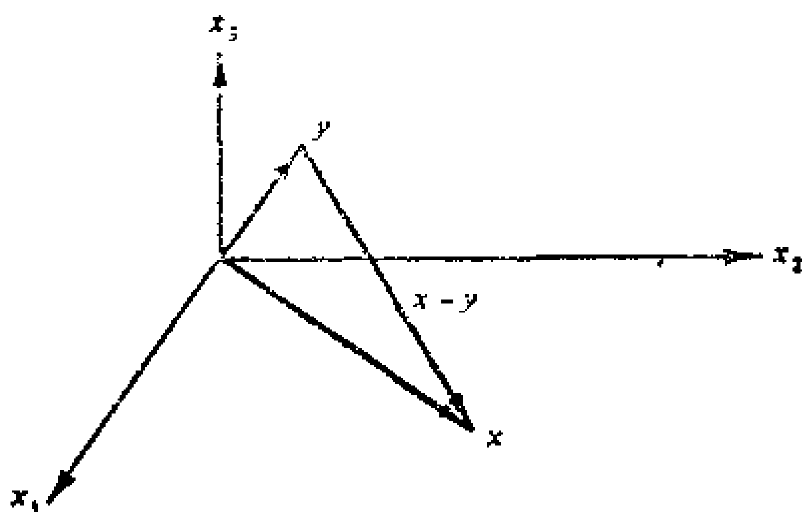


图 2.5 以x、y和$x-y$为边的平面三角形

也就是说，正交性的判别准则是什么呢？在二维平面内我们可以用三角来回答这一问题。对R^n中情形，我们也可以从x，y所张成的平面入手进行讨论。在这一平面内，如果x垂直于y，x，y就构成一个直角三角形，Pythagoras公式

$$\|x\|^2+\|y\|^2=\|x-y\|^2 \tag{13}$$

就应该成立。利用公式(12)，得到(13)成为

$$(x_1^2+\cdots+x_n^2)+(y_1^2+\cdots+y_n^2)=(x_1-y_1)^2+\cdots+(x_n-y_n)^2,$$

其右端为

$$(x_1^2+\cdots+x_n^2)-2(x_1y_1+\cdots+x_ny_n)+(y_1^2+\cdots+y_n^2).$$

这样，向量x，y正交，则(13)成立，则必

$$x_1y_1+\cdots+x_ny_n=0 \tag{14}$$

(14)可以写成一个$1\times n$矩阵（行向量x^T）与一个$n\times 1$矩阵（列向量y）的乘积x^Ty

$$x^Ty=[x_1\cdots x_n]\begin{bmatrix}y_1\\ \vdots\\ y_n\end{bmatrix}=x_1y_1+\cdots+x_ny_n. \tag{15}$$

利用和号Σ又可将(14)写成Σx_iy_i。凡对n维空间进行几何讨论时，都要用到这一表达式。有时称它为两个向量的纯量积或点积，记为(x, y)或$x\cdot y$。我们称它为内积，并使用记号x^Ty。

2R x^Ty是R^n中两个(列)向量x和y的内积。x和y当且仅当其内积为零时才正交。

我们指出向量的长与内积的关系为 $x^Tx=x_1^2+\cdots+x_n^2=\|x\|^2$。零向量是唯一长度为零的向量，零向量是唯一与自己正交的向量，零向量$x=0$与R^n中的每一个向量y都正交。

练习2.5.1 求 $x=(1, 4, 0, 2)^T$，$y=(2, -2, 1, 3)^T$的长度和内积。

我们已经证明了x和y在而且只在其内积为零时才正交。下一章将更详细地讨论内积*。下一章要做的事还有：对非正交向量进行讨论，用内积给出内积空间中余弦的定义，用内积确定两个向量之间的夹角等。本节所讲的虽然也还是四个子空间，但要探讨的性质是正交性。

首先，无关与正交之间有着一种简单的关系，非零向量v_1，…，v_k，如果彼此正交（其中任何一个都与其余的每一个正交），则必线性无关。

证明 假定$c_1v_1+\cdots+c_kv_k=0$，求该式两端与v_1的内积，得到

$$v_1^T(c_1v_1+\cdots+c_kv_k)=v_1^T0=0 \tag{16}$$

由于v_1，…，v_k正交，(16)式成为 $v_1^Tc_1v_1=0$。题设所给向量都非零，故$v_1^Tv_1\neq0$，从而$c_1=0$。换v_1为任何一个v_i，我们都得到c_i为零。这就是说，v_1，…，v_k的组合只在系数全为零时才为零。这就证得了它们是线性无关的。

R^n中坐标向量e_1，…，e_n是一组最重要的彼此正交的向量。它们是单位矩阵的列，它们构成R^n的最简单的基底，它们又都是单位向量（长度都为1，$\|e_i\|=1$）。几何上它们是坐标轴上的点。将该向量组旋转就得到一个新的正交组，新的一组彼此正交的单位向量。在平面上，即二维情况下，这一旋转产生的两个正交向量为

$$v_1=(\cos\theta, \sin\theta), \quad v_2=(-\sin\theta, \cos\theta)$$

练习2.5.2 试在 R^2 中先举出一组线性无关但彼此不正交的

* 或者说，将从另一个角度对它进行讨论。

向量，从而就证明了上述定理的逆定理不成立。再举出一组彼此正交但不是线性无关的向量，从而说明定理中非零这一条件不可去。

练习2.5.3 解析几何告诉我们，平面上两条直线，如果互相垂直，则斜率的积为-1。试将这一点应用于向量 $x=(x_1, x_2)$ 和$y=(y_1, y_2)$，它们的斜率为x_2/x_1和y_2/y_1，从而再一次导出正交的条件$x^Ty=0$

练习2.5.4 试证，$i\neq j$时B的第i行正交于B^{-1}的第j列。

练习2.5.5 指出下列向量中正交的对

$$v_1=\begin{bmatrix}1\\2\\-2\\1\end{bmatrix},\qquad v_2=\begin{bmatrix}4\\0\\4\\0\end{bmatrix},\quad v_3=\begin{bmatrix}1\\-1\\-1\\-1\end{bmatrix}.$$

练习2.5.6 试求出R^3中与$(1, 1, 1)$和$(1, -1, 0)$都正交的所有向量，并用已知的两个向量与求得的一个向量构成R^3的一个彼此正交的单位向量组。

正交子空间

下面我们来讲子空间的正交性。在一般的三维空间内，可以用过原点的直线或平面表示子空间。极端情况的两个子空间是单个的原点和整个的空间。子空间$\{0\}$与一切子空间都正交。一条直线与另一条直线或与一张平面都可以正交，但平面与平面不能正交*。全空间R^3只与$\{0\}$正交。在n维空间中基本定义是

2S V和W是同一空间R^n的两个子空间。如果V的任何一个向量v与W的任何一个向量w都正交，也即$v^Tw=0$对所有的v和w都成立，则称V和W是正交的。

例 设V是由$v_1=(1, 0, 0)$和$v_2=(1, 1, 0, 0)$生成的平面，W是由$w_1=(0, 0, 4, 5)$生成的直线。由于w_1与v_1，v_2都正

* 房间里的北墙与东墙看上去该是相垂直的平面，但按照我们的定义它们不是；有分属这两面墙但交角不为直角的直线v与w。

交，所以直线W与整个平面V正交。

练习2.5.7 对刚举的例子，试求出一个w_2，使得由w_1和w_2所生成的平面也与V正交。再求一个v_3，使得由v_1，v_2，v_3生成的三维子空间与例中原来的直线W正交。

练习2.5.8 试证，如果子空间V，W正交，则它们共同的唯一向量是零向量，即$V\cap W=\{0\}$。

现在我们来解释为什么要引进正交性。我们知道，从矩阵产生的四个基本子空间中，两个（化零子空间$\mathcal{N}(A)$和行空间$\mathcal{R}(A^T)$）是R^n的子空间，另外两个在R^m中。关于这四个空间，除维数外，最重要的事实是他们正交。

2T 对任何$m\times n$矩阵A，R^n中化零空间$\mathcal{N}(A)$与行空间$\mathcal{R}(A^T)$正交；R^m中左化零空间$\mathcal{N}(A^T)$与列空间$\mathcal{R}(A)$正交。

证明Ⅰ 设w是化零空间$\mathcal{N}(A)$中任何一个向量，则$Aw=0$。该方程组可展开成

$$Aw=\begin{bmatrix}\text{行}1\cdots\\ \text{行}2\cdots\\ \vdots\\ \text{行}m\cdots\end{bmatrix}\begin{bmatrix}w_1\\ w_2\\ \vdots\\ w_n\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\ 0\\ \vdots\\ 0\end{bmatrix} \tag{17}$$

第一个方程表示的是，一个内积为零，即向量w正交于A的第一行，或者说正交于A^T的第一列。第二个方程表明w正交于A^T的第二列。类推下去，得w正交于A^T的每一列。从而w正交于由这些列所生成的整个空间，也即正交于A^T的列空间的每一个向量v。这对化零空间的每一个w都成立。这样，我们就证明了$\mathcal{N}(A)\perp\mathcal{R}(A^T)$。

定理的第二部分是$\mathcal{N}(A^T)\perp\mathcal{R}(A)$。这不过是把第一部分用于$A^T$（前面证明了第一部分对任何矩阵都成立，当然对$A$的转置矩阵也成立）。我们换一个方式，考虑左化零空间中的y，那么，从

$$y^TA=[y_1\cdots y_n]\begin{bmatrix}\text{列} & & \text{列}\\ & \cdots & \\ 1 & & n\end{bmatrix}=[0\cdots 0]$$

我们得到y正交于A的每一列，从而它也就正交于这些列的每一个组

合，也即$\mathcal{N}(A^T)$中的每一个y与$\mathcal{R}(A)$中的每一个w都正交。

证明Ⅱ 我们不从向量考虑，而是整体地进行证明。作为“抽象”与“具体”推理方法相对照的特例，从比较中读者会获得益处。希望也相信读者会理解得更清楚，掌握得更牢固。

假定 w属于$\mathcal{N}(A)$，v属于$\mathcal{R}(A^T)$，那么$Aw=0$，可以对某个x把v写成$v=A^Tx$（在具体记法中，v是A^T的列的组合，x_1，…，x_n是组合的权），从而

$$w^Tv=w^T(A^Tx)=(w^TA^T)x=(Aw)^Tx=0^Tx=0. \tag{18}$$

例 设A是练习2.4.2中的矩阵

$$A=\begin{bmatrix}0&1&4&0\\0&2&8&0\end{bmatrix}\to U=\begin{bmatrix}0&1&4&0\\0&0&0&0\end{bmatrix}.$$

第二列是基本列，其余三个变量是自由的，从而依次置自由变量为1解$Ux=0$，我们得到三个向量，它们构成A的化零空间的基底

$$\begin{bmatrix}1\\0\\0\\0\end{bmatrix},\begin{bmatrix}0\\-4\\1\\0\end{bmatrix},\begin{bmatrix}0\\0\\0\\1\end{bmatrix}.$$

由2T知这三个向量正交于A的行。

A的列空间是一维的(行的秩=列的秩)，由基本列$\begin{bmatrix}1\\2\end{bmatrix}$张成。另一方面，$A$的行的组合产生$U$的零行，组合的系数构成化零空间的向量。由$(-2)$（行1）+（1）（行2）= 0知$y^T=(-2, 1)$属于左化零空间，定理断言它正交于列空间

$$\begin{bmatrix}-2&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\2\end{bmatrix}=0.$$

现在我们要求读者再多一点耐心。化零空间正交于行空间，这是当然的。但这话不完全。除$\mathcal{N}(A)$的向量正交于行空间之外，还应加上一句正交于行空间的向量全在$\mathcal{N}(A)$中。化零空间由$Ax=0$

的所有解构成。

2U 定义 给定V是R^n的子空间，则由正交于V的全体向量所构成的空间称为V的正交补。记为$V^{\perp}$。

根据这一定义，化零空间$\mathcal{N}(A)$是$\mathcal{R}(A^T)$的正交补，$\mathcal{N}(A)=(\mathcal{R}(A^T))^{\perp}$。同时，反向关系也成立，行空间$\mathcal{R}(A^T)$包含正交于化零空间的全体向量。这不是很明显的，因为在解$Ax=0$时，我们考虑的是行空间，求的是正交于行空间的向量x的全体。现在要反过来，假定R^n中某向量的z正交于化零空间但不属于行空间，那么把z作为A的额外行加上去，这使行空间扩大但不改变化零空间。可是我们知道有固定的公式$r+(n-r)=n$，或者

行空间的维数＋化零空间的维数＝列数。

因为加上新行不改变等式中后两个数，从而第一个数也就不可能改变。结论是正交于化零空间的向量全都在行空间中，$\mathcal{R}(A^T)=(\mathcal{N}(A))^{\perp}$。

同样的推理方法用于A^T，我们得到对偶结果：R^m的左化零空间与列空间$\mathcal{R}(A)$互为正交补。这就完成了线性代数基本定理的后半部分。前半部分给出了四个基本子空间的维数，包括行空间的维数与列空间的维数相等。现在我们知道，它们不仅垂直，并互为正交补。

2V 线性代数基本定理（下）

$\mathcal{N}(A)=(\mathcal{R}(A))^{\perp}$，$\mathcal{R}(A^T)=(\mathcal{N}(A))^{\perp}$，

$\mathcal{N}(A^T)=(\mathcal{R}(A))^{\perp}$，$\mathcal{R}(A)=(\mathcal{N}(A^T))^{\perp}$。

最后一个等式表明，$Ax=b$当且仅当b正交于$\mathcal{N}(A^T)$时才有解；当且仅当b正交于转置齐次方程组$A^Ty=0$的每一个解y时，b才在列空间中。

我们强调指出，两个子空间V和W可以彼此正交，而不互为正交补。在三维空间中，$(1,0,0)$生成的直线V正交于$(0,0,1)$生成的直线W，但V不等于$W^{\perp}$。W的正交补是一个二维子空间，含有全体状如$(x_1, x_2, 0)$的向量。直线V只是$W^{\perp}$的一部分，它的维数不够大。如果维数够大，则两个正交子空间必定互为正交补。行

空间和化零空间就是维数够大的。进一步，如果$W=V^{\perp}$，那就保证了维数合乎要求，也就有$V=W^{\perp}$。如图2.6所示，空间被分成了垂直的两部分V和W。

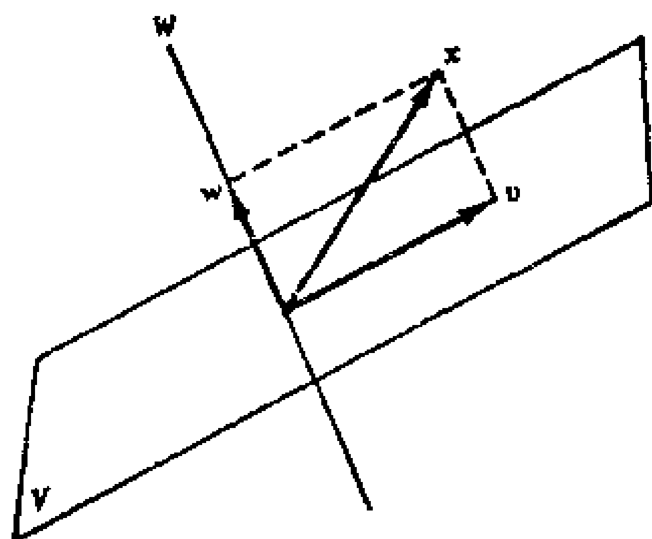


图 2.6 空间R^3的正交分解

图2.6所表明的定理为

如果V和W是R^n的子空间，那么下面的每一个条件都保证它们互为正交补：

(1)$W=V^{\perp}$（W由正交于V的全体向量组成）。

(2)$V=W^{\perp}$（V由正交于W的全体向量组成）。

(3)V和W互相正交，且V的维数加上W的维数等于n。

这三个等价条件中只要有一个满足，每一个向量x就都可以唯一地分解为$x=v+w$，v和w分属于V和W。分解成的两部分，也即x到V和W的投影必正交，$v^Tw=0$。

我们将前节和本节一起作一小结。这两节完整地描述了矩阵的作用。前一节得到了四个基本子空间的维数，特别，行空间$\mathscr{R}(A^T)$和列空间$\mathscr{R}(A)$的维数都是r。本节完成了给这四个子空间定向。R^n中的两个互为正交补，R^m中的两个也互为正交补。图2.7是对矩阵A的作用的一种表示。任何一个向量x都可被分解成x_r+x_n，并A变行空间向量x_r为列空间中向量$Ax_r=Ax$，变化零空间分量x_n为零*。

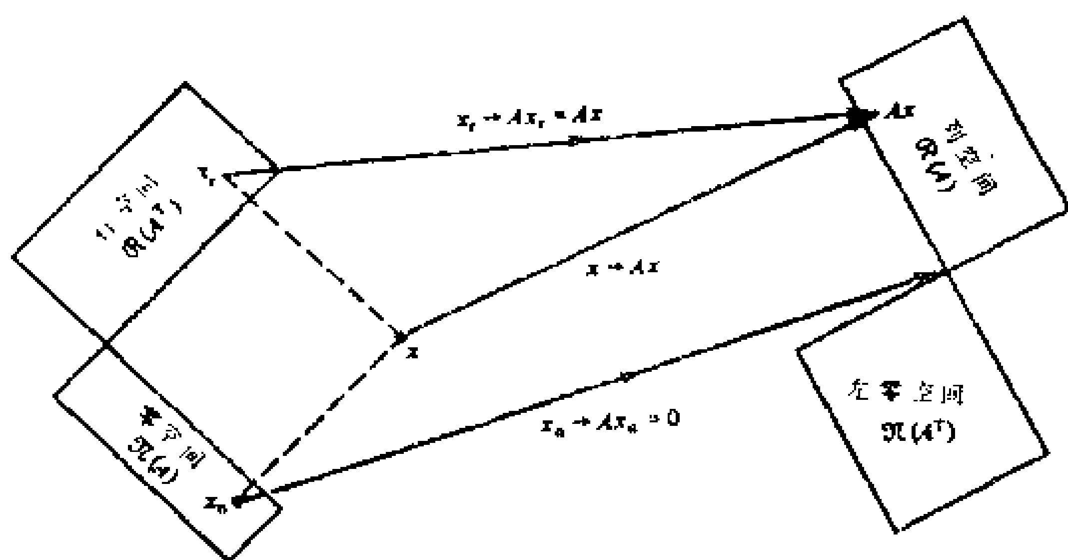


图 2.7 矩阵A的作用**

2W 从行空间到列空间的映射是非奇异的，或者说，是可逆的。列空间中的每一个向量b都来自行空间，并且只来自行空间一个向量。

证明 如果b属于列空间，它是列的某一组合Ax。分解x为x_r+x_n，x_r和x_n分别属行空间和化零空间。则$Ax_r=Ax_r+A_n=Ax=b$，从而得到b来自行空间的x_r。如果有另外一个向量x_r'，也属于行空间，也满足$Ax'r=b$，那么$A(x_r-x'_r)=b-b=0$。这是说，$x_r-x'_r$既属于化零空间又属于行空间，这使得它正交于自己。因此它是零，也即$x_r=x'_r$。

矩阵A，当它可以被理解为从某个r维子空间$\mathscr{R}(A^T)$到另一个r维空间$\mathscr{R}(A)$的变换的时，它是可逆的。作用于正交补$\mathscr{N}(A)$，A是零矩阵。同样的，A^T是反方向的，从$\mathscr{R}(A)$到$\mathscr{R}(A^T)$的可逆变换。这不意味着A^T是A的逆矩阵；A^T变Ax为A^TAx，而A的逆矩阵（或者在§3.4所讨论的奇异情况下，是A的伪逆矩阵）变Ax为n。

* 我们并不实际地知道怎样画r维和$n-r$维的这两个正交子空间。如果你已經理解这维数和正交性，那就不要管图2.7，以免引起混淆。

图2.7中的零空间应为化零空间，符号应为$\mathscr{N}(A)$，左零空间应为左化零空间，符号应为$\mathscr{N}(A^T)$。

练习2.5.9 求由向量(1，1，2)和(1，2，3)所张成的平面的正交补，求法是用这两个向量作A的列，解$Ax=0$。我们记得所求正交补是一条直线。

练习2.5.10 构造一个齐次方程，未知数的个数为3，解为向量(1，1，2)和(1，2，3)的线性组合。这是上一题的反问题，但这两个题目实际上是一样的。

练习2.5.11 线性代数的基本定理，常常按Fredholm方式陈述为：对任何的A和b，方程组

(1)$Ax=b$和(2)$A^Ty=0$，$y^Tb\neq 0$

中必定有一个，并且只有一个有解。换句话说，或者b属于列空间$\mathscr{R}(A)$，或者$\mathscr{N}(A)$中有y，使得$y^Tb\neq 0$。将b分为列空间分量和左化零空间分量，就得到一个所要的y。

练习2.5.12 求

$$A=\begin{bmatrix}1&0&2\\1&1&4\end{bmatrix}$$

的化零空间的基底，并验证它正交于行空间。给定$x=(3,3,3)$，试将它分解为行空间分量x_r和零空间分量x_n。

练习2.5.13 试证$V+W$的正交补是V的正交补的W的正交补的交，即$(V+W)^{\perp}=V^{\perp}\cap W^{\perp}$。(两个子空间的和的定义见2Y)

练习2.5.14 A^T变$\mathscr{R}(A)$为行空间，变左化零空间为零，试用图2.7对A^T的这种作用进行解释。

关联矩阵与基尔霍夫定律

图2.8所示网络中的稳态直流电流服从Kirchhoff(基尔霍夫)定律：

(1)任一节点处流入和流出的电流强度的总和都相等。如在节点1处$I_3=I_1+I_4$。

(2)每一闭合回路中压降的和都为零。记I_K沿箭号方向的压降为E_K，则在以节点1，4，3为顶点的三角形网络中，依定律必

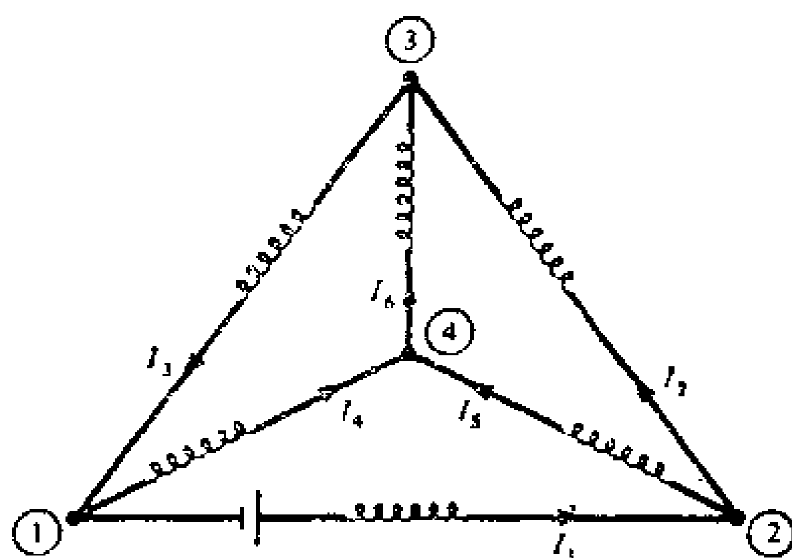


图 2.8　四节点支路网络

有$E_4+E_6+E_5=0$。

我们用矩阵代数来表示这两条定律。所得表达式可以因网络的画法（节点的连接方法和箭号的方向）不同而不同，但不因电阻（或电池）的大小而改变*。节点之间的连接可由网络的关联矩阵完全表达出来。关联矩阵每行对应于一个节点，每列对应于一条支路。每一列中+1和−1分别表示节点为支路的起点和终点。图2.8所示网络的关联矩阵为

$$M=\begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & 1 \end{bmatrix}\begin{matrix} \text{节点}1 \\ \text{节点}2 \\ \text{节点}3 \\ \text{节点}4 \end{matrix}$$

我们看M中对应于节点1的第一行。−1表示节点1是支路3的终点，两个+1表示节点1为支路1和4的起点。由Kirchhoff第一定律知$I_3=I_1+I_4$，用矩阵把这一点表示出来就是：记6个电流所构成的列向量为I，则$MI=0$。这是一个含6个未知数四个方程的方程组。

---

* 换句话说，Kirchhoff定律是"平衡条件"，需要以欧姆定律$E=IR$作为它的补充。

为用矩阵表示出基尔霍夫第二定律，我们规定节点 1 的电位 $P_1=0$，并定义点i到点j（如果i，j之间有支路相通）的压降为电位差$E=P_i-P_j$。第二定律指出，沿回路的总压降为零。它的矩阵表示为：任何一条支路上的压降P_i-P_j都等于该支路所对应的列乘上电位向量p。由列的构造我们知道该支路所对应的列上，节点i处为$+1$，节点j处为-1。换句话说压降E是M^Tp的分量。

这样，Kirchhoff定律就可以简单地陈述为，I在M的化零空间中，E在M的行空间中。由于任何M的这两个空间都正交，从而我们就证明了电路理论中的Tellagen定理：$E^TI=0$。

例 假定我们把一个20伏特的电池接进第一支路，产生电流I_1。由对称性知，I_1的一半通过节点 3 流回，一半通过节点 4 流回，不影响支路 6，$I_6=0$。如果电阻的总值$R=5$，我们可以验证$I_1=2$，$I_2=I_3=-I_4=I_5=1$。（注意，箭号指向随意，它只是给电路标定一个方向，$I_4=-1$表示I_4的流向与箭号相反）电流通过底部电阻所产生的压降为$E=IR=10$（伏特），通过电阻 2，3，4，5 所产生的压降都是 5 伏特。总压降等于电池的电压20伏特。可见基尔霍夫定律是满足的，电流数值是对的。

练习2.5.15 求出各支路上的压降，给定$P_1=0$，求电位P_2，P_2，P_4。验证$E^TI=0$。

练习2.5.16 试画出关联矩阵

$$M=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

所表示的网络。设在支路1-3中接入一个 6 伏特的电池，又设各支路的电阻都为 1，求各支路上的电流 I 和压降 E。

§2.6 子空间对与矩阵的乘积

本章的目的是讨论线性方程组$Ax=b$。前面每一个新的概念和定义（包括向量空间和线性无关，基底和维数，秩和零度，内积和正交）都是为着这一讨论而引入的。下面我们回过头去看一下这些概念之间的另外几种关系*。

我们要看的不是单个子空间或单个矩阵的内部关系，而是两个子空间或两个矩阵之间的关系。这些关系大多都很简单。我们要看的第一种关系是

2X 如果V和W是某个向量空间的子空间，那么它们的交就也是该空间的子空间。

证明是简单的，设x和x'属于$V\cap W$，也即它们既属于V又属于W，那么由V和W本身都是向量空间，我们得知$x+x'$和cx也都既属于V也属于W，从而也就属于V和W的交。几何上通过原点的两个平面（或R^n中两个超平面）的交是子空间。多个甚至无穷多个子空间的交也是子空间。

例1 两个正交子空间V和W的交是子空间$\{0\}$。

例2 $n\times n$矩阵的全体是一个向量空间，视上三角矩阵全体和下三角矩阵全体为它的子空间V和W，则V和W的交为$n\times n$对角矩阵全体。$n\times n$对角矩阵的全体当然构成子空间。对角矩阵相加或乘上一个数得到的仍然是对角矩阵。

例3 设V是$k\times n$矩阵A的化零空间，W是$l\times n$矩阵B的化零空间，则$V\cap W$是由A的k行和B的l行所成的矩阵

$$C=\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix}$$

的化零空间。证：设x属于C的化零空间，则当且仅当$Ax=0$且$Bx=0$

---

*）2X和2Y是两个最重要的关系。本节讲的另外几点更多地是为着理论上的需要，而不是为着应用的。

时才有$Cx=0$。

例 4　设v_1，…，v_k是R^n中的一个向量集合。考虑含有这一集合的所有子空间；R^n是这种子空间中的一个（每一个向量空间都是它自己的子空间），还可以有另外的这样的子空间。所有这些子空间的全体的交是含有所给向量的最小子空间，这最小子空间是由v_1，…，v_k生成的子空间。

通常讨论了两个集合的交之后，接下去自然地是对它们的并进行同样的讨论，对向量空间则不然，两个子空间的并$V\cup W$一般不是一个子空间，我们考虑平面上的x轴和y轴，它们各自都是一个子空间，但是它们的并不是子空间。（1，0）与（0，1）的和既不在x轴上也不在y轴上。不难看出，除非一个子空间含于另一个之中，否则两个子空间的并恒不为子空间。一个含于另一个之中时，它们的并（与大的一个重合）也是一个子空间。

这里我们也还是要把两个子空间合在一起，但考虑的不是它们的并，而是它们的和。

2 Y　如果V和W是某空间的两个子空间，则它们的和也是该空间的子空间，和$V+W$由所有可能的$x=v+w$构成，v和w分别是V和W中的任何向量。

$V+W$不过是由$V\cup W$张成的一个空间。它是同时包含V和W的最小空间。x轴和y轴的和是整个x-y平面，一个二维平面和一条不在该平面上的直线的和是一个三维空间。

例 5　设R^n中的V和W互为正交补，则它们的和$V+W=R^n$；每一个x都是它在V中的射影v和它在W中的射影w的和。

例 6　设V、W分别是上、下三角矩阵所成空间，则$V+W$是全体矩阵所成空间。每一个矩阵都可以写成上、下两个三角矩阵的和。写法有多种，因为对角线的取法不唯一。

例 7　设V是矩阵A的列空间，W是矩阵B的列空间，则$V+W$是组合矩阵$Q=[A\quad B]$的列空间。$V+W$的维数可以低于V的维数与W的维数的和，因为V与W可以重叠，但易于求得

$$(V+W)\text{的维数}=Q\text{的秩} \tag{19}$$

预想不到的是，$V\cap W$的维数的计算要巧妙得多。假定给了基底v_1，…，v_k和w_1，…，w_l，要求出这两个子空间的交的基底，当然只知道v_1，…，v_k中是否有哪一个与w_1，…，w_l中的某一个相等是不够的；甚至这两个空间相同，$V=W$，它们的基底也可以完全不同。

最有效的方法是构成以v_1，…，v_k，w_1，…，w_l为列的矩阵Q，求出Q的化零空间$\mathscr{N}(Q)$。我们将证明，由这一化零空间的基底可以导出$V\cap W$的基底，结果是这两个空间的维数相同

$$(V\cap W)\text{的维数}=\mathscr{N}(Q)\text{的维数}. \tag{20}$$

将(19)与(20)两式相加，得

$(V+W)$的维数$+(V\cap W)$的维数$=Q$的秩$+Q$的零度。

这是一个重要的公式。从对四个基本子空间进行的计算，我们知道秩加上零度等于列数。具体到这里，Q的列数为$k+l$，而k等于V的维数，l等于W的维数。从而我们得到

$$(V+W)\text{的维数}+(V\cap W)\text{的维数}$$
$$=V\text{的维数}+W\text{的维数} \tag{21}$$

这也是一个有用的公式。

例 8 上下三角矩阵空间V和W的维数都是$n(n+1)/2$，全体$n\times n$矩阵所成空间$V+W$的维数为n^2，对角矩阵所成空间$V\cap W$的维数为n。作为(21)的一个例子我们有$n^2+n=n(n+1)/2+n(n+1)/2$。

现在我们对(20)进行证明。此处更注重的是证明技巧，而不是实际计算。这是本书中仅有的一次。将一个空间与另一个相比较，从而引出该空间的性质，在这里是导出有用的公式(21)，这种比较法本书中也只用了这么一次。首先注意Q的化零空间是R^{k+l}的子空间，而$V\cap W$是R^m的子空间。我们要证明的是这两个空间的维数相同，方法是依下面的对应关系将两个空间进行比较：

对Q的化零空间中的任一向量x按列写出方程$Qx=0$，即

$$x_1v_1+\cdots+x_kv_k+x_{k+1}w_1+\cdots x_{k+l}w_l=0$$

或

$$x_1v_1+\cdots+x_kv_k=-x_{k+1}w_1-\cdots-x_{k+l}w_l。$$

左端为v_k的组合，显然在V中，右端在W中。从而它们所代表的向量y在$V\cap W$中。这就提供了$\mathcal{N}(Q)$中的x与$V\cap W$中的y之间的一种对应。易知，这种对应关系经过加法和数乘保持不变：也即如果x对应于y，x'对应于y'，则$x+y$对应于$x'+y'$，cx对应于cx'。进一步我们知道$V\cap W$中的每一个y都来自$\mathcal{N}(Q)$中的一个而且是唯一的一个x，（习题2.6.5）。

这是两个向量空间同构的一个极好的例子。这是不相同的两个空间，但对各种代数关系来说，他们是完全一样的。可以完全对应起来：线性无关组对应于线性无关组；一个中的基底对应于另一个中的基底。由此知他们的维数相等。(20)和(21)的证明也就完成了。这是代数中常用的方法，把具有某些相同点的两个不同对象看做是一样的。数域和（有限）维数都相同的任何两个空间都恒同构。象$\mathcal{N}(Q)$和$V\cap W$表面上差别这么大的两个空间，可以被看成是相同的，这是很有意思的。

例 9 设V和W分别是由

$$Q=\begin{bmatrix}4&2&0&0\\0&3&-6&0\\0&0&0&1\end{bmatrix}$$

的前两列和后两列张成的。矩阵Q已经是阶梯阵$Q=U$，自由变量（没有主元的列）是第三个。因而第一、二、四列张成$V+W$，它的维数为3，它就应该是R^3。为得到$V\cap W$，我们先算出Q的化零空间，令自由变量$x_3=1$，用反向代入法求得基本变量为$x_4=0$，$x_2=2$，$x_1=-1$。$Qx=0$的这一个解为$x=(-1,2,1,0)^T$。此时$\mathcal{N}(Q)$与$V\cap W$之间的对应向量为

$$y=(-1)(\text{第一列})+(2)(\text{第二列})$$

$$=(-1)\begin{bmatrix}4\\0\\0\end{bmatrix}+(2)\begin{bmatrix}2\\3\\0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\6\\0\end{bmatrix}.$$

这是交$V\cap W$的一个基底。

练习2.6.1 在全体4×4矩阵所成空间中，取三对角矩阵子空间为V，取上三角矩阵子空间为W。试描述子空间$V+W$和$V\cap W$，$V+W$的成员是上Hessenberg矩阵，请验证公式(21)。

练习2.6.2 假定$V\cap W=\{0\}$，则由(21)得知$(V+W)$的维数等于V的维数加上W的维数。试证$V+W$中的每一个x都可以唯一地表示成$x=v+w$，其中v在V中，w在W中。换句话说，如果$x=v'+w'$，则应证明$v=v'$，$w=w'$。在这种情况下，由于$V\cap W=\{0\}$，称$V+W$为V和W的直和。有时记直和为$V\oplus W$。正交子空间的和恒为直和，任何两个子空间，如果零向量是它们唯一的共有向量，则这两个子空间的和为直和。

练习2.6.3 假定V是由分量为$(1,1,0,1)$和$(1,2,0,0)$的列向量张成的。试求子空间W，使$V\oplus W=R^4$。记号的意义见练习2.6.2。

练习2.6.4 V由$v_1=(1,1,0,0)$，$v_2=(1,0,1,0)$张成，W由$w_1=(0,1,0,1)$，$w_2=(0,0,1,1)$张成。试求和$V+W$的基底，并求出$V\cap W$的维数和基底。

练习2.6.5 验证“$V\cap W$中的每一个y都来自$\mathcal{N}(Q)$中唯一的一个x”。试对给定的y给出求唯一可能的x的方法。

积AB的基本空间

前面我们讨论的是成对的子空间，现在我们转向讨论矩阵的乘积。对矩阵乘积进行讨论时，我们把着眼点提高了一层。提高到了行向量或列向量，而不是着眼于单个元素。乘积AB具有A，B所具有的一些性质。有时我们不考虑可以张成能反映整个矩阵性质的子空间那么多行或列。

A，B 和 AB，它们各自都有四个基本子空间。我们要讨论的主要问题是，这些基本子空间之间有着怎样的关系。这些关系中要紧的有四个。插一句，A，B 和 AB 都可以是矩形的。

(i) AB 的化零空间包含 B 的化零空间，

$$\mathcal{N}(AB)\supseteq\mathcal{N}(B)。$$

(ii) AB 的列空间含于 A 的列空间，

$$\mathcal{R}(AB)\subseteq\mathcal{R}(A)。$$

(iii) AB 的左化零空间包含 A 的左化零空间，

$$\mathcal{N}((AB)^T)\supseteq\mathcal{N}(A^T)。$$

(iv) AB 的行空间含于 B 的行空间，

$$\mathcal{R}((AB)^T)\subseteq\mathcal{R}(B^T)。$$

证明是很简单的

(i)若 $Bx=0$，则 $ABx=0$，因而 $\mathcal{N}(B)$ 的每一个元素都在 $\mathcal{N}(AB)$ 中，也即 $\mathcal{N}(B)\subseteq\mathcal{N}(AB)$

(ii)设 b 在 AB 的列空间中，也即设对某个 x 有 $ABx=b$，那么取 $y=Bx$，则 $Ay=b$，也即 b 在 A 的列空间中。这就证明了 $\mathcal{R}(AB)\subseteq\mathcal{R}(A)$。

另一证明方法直接来自矩阵乘法，AB 的每一列都是 A 的列的线性组合。

(iii)由于 $(AB)^T=B^TA^T$，视 B^T，A^T 为(i)中的 A，B，这第三条就成了第一条。

(iv)类似地，第四条就成了第二条。也可以由矩阵乘法直接导出。AB 的第 i 行是 B 的第 i 行的组合，组合的权是 A 的第 i 行的元素。因而 AB 的行空间含于 B 的行空间。

练习2.6.6 试举例证明：(i) AB 的化零空间不一定包含 A 的化零空间，(ii) AB 的列空间不一定含于 B 的列空间。

推论 秩 r 和零度 ν 满足关系

$$r(AB)\leqslant r(A),\quad r(AB)\leqslant r(B) \tag{22}$$

$$\nu(AB)\geqslant\nu(B) \tag{23}$$

AB的列空间含于A的列空间，而秩等于列空间的维数，由此我们直接得到$r(AB)\leqslant r(A)$。类似地，由(iv)我们得到$r(AB)\leqslant r(B)$，由(i)我们得到关于零度的不等式(23)。注意，我们没有试图去证明$\nu(AB)\geqslant\nu(A)$，该不等式对非方阵不一定成立。

练习2.6.7 试证对于有很多元素为零的矩阵，$\nu(AB)$可以小于$\nu(A)$。

上述关系有一种特殊的应用。设A为一个$m\times n$矩阵，其分解式为$PA=LU$（或$A=P^{-1}LU$）。我们知道U的最后$m-r$行全为零，把这全为零的行去掉，余下部分为$r\times n$矩阵。记它为$\overline{U}$（当秩r等于m时，就不存在为零的行，此时$\overline{U}=U$）。现在我们来看一下矩阵乘法

$$A=(P^{-1}L)U=(P^{-1}L)\begin{bmatrix}\overline{U}\\0\end{bmatrix}. \tag{24}$$

$P^{-1}L$的最后$m-r$列是与U的最后的全为零的行相乘，因而我们可以把这$m-r$列也去掉。记剩下部分为$\overline{L}$（实际上应为$\overline{P^{-1}L}$）。$\overline{L}$是$P^{-1}L$的前r列，这样去掉(24)中为零的部分我们得到一个新的分解式$A=\overline{L}\,\overline{U}$。

由关系(ii)知$A=\overline{L}\,\overline{U}$的列空间包含$\overline{L}$的列空间。我们又知道$A$的列空间的维数为$r$。$\overline{L}$只有$r$列，它的列空间不可能更大。从而得知这两个列空间是相同的。$\overline{L}$的列空间与A的相同，$\overline{U}$的行空间与A的相同。

练习2.6.8 试将矩阵

$$A=\begin{bmatrix}0&1&4&0\\0&2&8&0\end{bmatrix}$$

分解为$A=\overline{L}\,\overline{U}$，并验证$\overline{L}$的列是$A$的列空间的基底。

练习2.6.9 将矩阵换成

$$A=\begin{bmatrix}0&0\\1&2\\4&8\\0&0\end{bmatrix}$$

再做上一题，这里用到置换矩阵 P。

练习2.6.10 $\overline{L}$ 的每一列乘以 $\overline{U}$ 的对应的行，这样即可将 $A=\overline{L}\,\overline{U}$ 化为秩为 1 的 r 个矩阵的和。矩阵

$$A=\begin{bmatrix}1 & 3 & 3 & 2\\ 2 & 6 & 9 & 5\\ -1 & -3 & 3 & 0\end{bmatrix}$$

的秩为 2。试构造出它的 $\overline{L}$ 和 $\overline{U}$，将它分解为 r 个秩为 1 的矩阵的和。

最后我们考虑去掉某几行（也可以保留原有的行）和某几列（也可以保留原有的列）所得到的子阵 C，关于 C 的秩我们有

2 Z 设 $n\times n$ 矩阵 A 的秩为 r，则

(i)每一个子阵 C 的秩都 $\leqslant r$。

(ii)至少有一个 $r\times r$ 的子矩阵，其秩恰好为 r。

证明 我们分两步将 A 化为 C。第一步保持列数不变，只从 A 中去掉不含于 C 的行。记这个中间矩阵为 B，则 B 的行空间显然含于 A 的行空间。从而 B 的秩 $\leqslant A$ 的秩 $=r$。第二步从 B 中去掉不含于 C 的列。则 C 的列空间含于 B 的列空间，从而 C 的秩 $\leqslant B$ 的秩 $\leqslant r$。(i)证完。

为证(ii)，假定 B 是由 A 的 r 个无关行构成的，那么 B 的行空间的秩为 r，B 的列空间的秩也为 r，再假定 C 是由 B 的 r 个无关列构成的，那么 C 的列空间的秩为 r。从而 C 的秩为 r。(ii)证完。也即每一个秩为 r 的矩阵都含有一个 $r\times r$ 的非奇异子矩阵。

例10 我们再一次考虑秩为 2 的 3×4 矩阵

$$A=\begin{bmatrix}1 & 3 & 3 & 2\\ 2 & 6 & 9 & 5\\ -1 & -3 & 3 & 0\end{bmatrix}\text{以及它的子矩阵 }C=\begin{bmatrix}1 & 3\\ 2 & 9\end{bmatrix}.$$

A 的 3×3 子矩阵中只有 C 是非奇异的，其余的全是奇异的。

该定理不值得过分强调。表面上看它有些象上节末尾的定理 2 W。2 W是一个重要的定理。那个定理说，每一个 A 都是一个从

它的 r 维行空间到它的 r 维列空间的可逆变换，这两个空间和一个变换就给出了 A 的全部信息，知道变换就可以写出整个矩阵。而本定理只是一个求可逆子矩阵 C 的问题。求得的 C 也并无什么特别的地方。在具体的例子中可以有很多个另外的 r 阶可逆子矩阵。从本定理中我们得到的仅仅是秩的一个新的等价定义：秩是最大非奇异子矩阵的阶。

练习2.6.11 求 $A=\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 6 & 9 \end{bmatrix}$ 的最大可逆子矩阵和秩。

下面是几个抽象性强一些的习题，有助于提高证明能力

练习2.6.12 设 A，B 分别为 $m\times n$ 和 $n\times m$ 矩阵，$n<m$。试证它们的积 AB 是奇异的。

练习2.6.13 试证 $(A+B)$ 的秩 $\leqslant A$ 的秩 $+B$ 的秩。

练习2.6.14 设 $\mathcal{N}(AB)=\mathcal{N}(B)$，又设向量 y 既属于 $\mathcal{R}(B)$ 又属于 $\mathcal{N}(A)$。试证 $y=0$。

练习2.6.15 设 A 为可逆方阵，试证 AB 的化零空间、行空间和秩都同于 B。提示：对 A^{-1} 与 AB 的积应用 2 Z 中的关系(i)。

练习2.6.16 考虑由全体 2×2 矩阵 B 所组成的四维向量空间 V。设 A 是一个特殊的矩阵，按每一个 2×2 矩阵 B 都被变成 AB 这样的方式进行变换，则 V 变成它自己。如果 A 可逆，则该变换没有化零空间，唯一被变成零的矩阵（$AB=0$）是矩阵 $B=0$。

(i) 设 $A=\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 2 & 0 \end{bmatrix}$，试求该变换的化零空间（满足 $AB=0$ 的所有的 B 所成的空间），并求出它的维数（即变换的零度，而不是 A 的零度）。

(ii) 求出该变换的值域（或"列空间，也即全体矩阵 AB 所成的空间，其中 $A=\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 2 & 0 \end{bmatrix}$，$B$ 是变化的），并计算出该值域的维数（它是变换的秩，而不是 A 的秩），再验证秩＋零度＝V 的维数。

复　习　题

2.1　求R^4的子空间的基底，子空间中$x_1=x_2=x_3$。

2.2

$$A=\begin{bmatrix}1 & 2 & 0 & 2 & 1\\ -1 & -2 & 1 & 1 & 0\\ 1 & 2 & -8 & -7 & -2\end{bmatrix}$$

试求出A的阶梯阵U和四个基本子空间的维数。

2.3　用给出基底的方法写出R^3的二维子空间，要求其中不包含向量（1,0,0），（0,1,0）和（0,0,1）中的任何一个。

2.4　试求出A的秩和化零空间

$$A=\begin{bmatrix}0 & 0 & 1\\ 0 & 0 & 1\\ 1 & 1 & 1\end{bmatrix}.$$

2.5　构造一个矩阵，其化零空间由$[1\ 0\ 1]^T$张成。

2.6　判断下列各条成立否，不成立的请举出反例。

(i)如果向量x_1，…，x_m生成子空间S，则S的维数为m。

(ii)向量空间的两个子空间的交不能是空的。

(iii)若$Ax=Ay$，则$x=y$。

(iv)A的行空间有唯一的基底，可以用化A为阶梯阵的方式求出来。

(v)若方阵A的列线性无关，则A^2的列也线性无关。

2.7　试求出A，B，C它们各自的四个基本子空间的基底，

$$A=\begin{bmatrix}1 & 2\\ 3 & 6\end{bmatrix},\quad B=\begin{bmatrix}0 & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix},\quad C=\begin{bmatrix}1 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 1\end{bmatrix}.$$

2.8　求出$u+v+w=1$，$u-w=2$的通解。

2.9　其行空间包含$[1\ 1\ 1]^T$，其化零空间包含$[1\ 0\ 0]^T$，问这样的矩阵存在否？

2.10　求出正交于（1,4,4,1）和（2,9,8,2）的所有向量。

2.11　向量（1,2,1），（0,1,3）和（3,7,6）是否位于R^3中的同一张平面上？如果是，请求出正交于这张平面的一个向量。

2.12 $Ax=b$。问当且仅当 b 正交于四个基本子空间中哪一个时，该方程组才有解。

2.13 试求出下列方程组的所有解

$$\begin{bmatrix}1&1&1\\2&1&1\\3&1&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2\\3\\4\end{bmatrix},\quad \begin{bmatrix}1&1&1\\2&1&1\\3&1&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2\\3\\5\end{bmatrix}.$$

2.14 向量(1，1，3)，(2，3，6)和(1，4，3)是否构成 R^3 的一个基底?

2.15 试求出矩阵 A，使 $Ax=b$ 的解的个数为

(i) 0 或 1，决定于 b；

(ii) 1 或∞，决定于 b；

(iii) 0 或∞，决定于 b；

(iv) 1，与 b 无关。

2.16 问上题中每种情况下 r 与 m 和 n 有着怎样的关系?

第三章 正交射影和最小二乘法

§3.1 内积和转置

我们已经知道两个向量 x 和 y 的内积是一个数量$x^T\cdot y$。止此，我们感兴趣的仅仅是此内积是否为零。换句话说，两个向量是否是正交的。现在我们将允许内积可以不为零，也就是说，夹角可以不是直角，并将解释内积与夹角的关系。在第一节里，我们将弄清楚内积与转置之间的联系。在上一章中，转置是由把矩阵如薄烤饼一样翻转一下而得到的。而这一节则必须把它解释得更严格一些。

如果我们也试图概述一下本章的其余部份，那么一个不可回避的事实是**正交的情形是最最重要的**。假设在n维空间中给定一个点b，我们希望求出它到一条给定的直线，例如：沿向量a的方向的直线的距离。也就是说，我们要在这条直线上找出一个点p，它距b最近。那么，正如众所周知，连接这样一个点p与b的直线（图3.1中的虚线）一定与原来的向量a相垂直。这个事实使我们能找出最近点p，并求出它到b的距离。虽然给定的向量a和b不是正交的，可是问题的解却自然而然地引进正交性。

如果我们给定的不是一条沿a方向的直线，而是一个平面，或者更一般地给定R^n中的一个任意的子空间S，情形是一样的。课题仍然是求子空间S中的一点p，使它距b点最近，而且**这个点p也仍然是b在这个子空间中的射影**。当我们由b点出发画一条直线与S垂直时，p点就是这条垂线与子空间的交点。用几何术语来说，这是关于点b与子空间S之间的距离这样一个很自然的问题的简单回答。但是这里有几个问题需要提出来给予回答：

（1）这个课题在实际应用中真的出现吗？

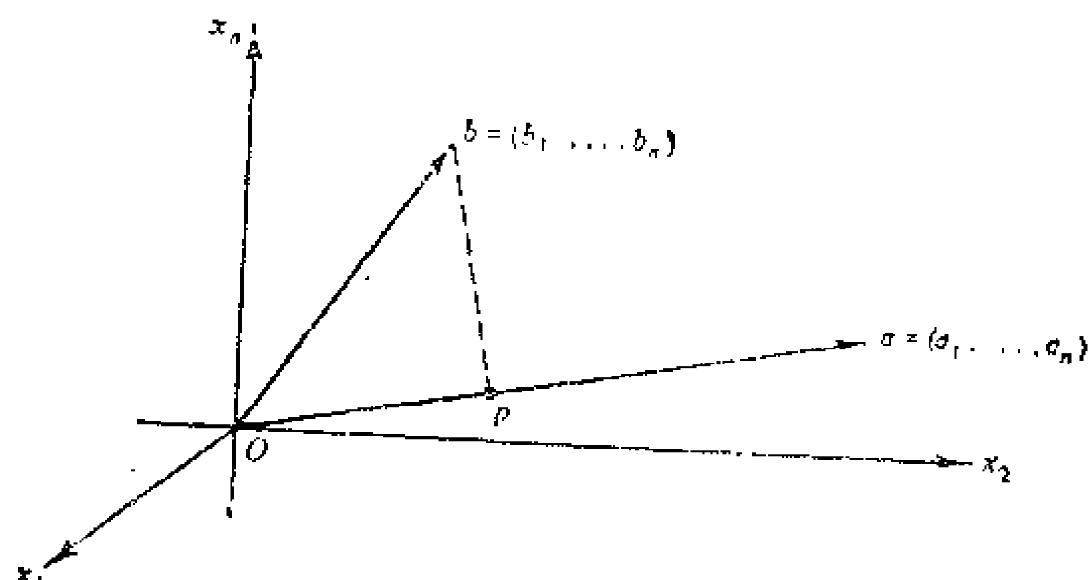


图 3.1

（2）从分析上看，如果子空间 S 是用给定一组基（或者甚至是张成它的一个向量组）的方法来描述的，那么是否有一个确定点 p 的解析公式？

（3）从计算的角度来看，是否有一种使用这个公式来确定 p 点的数值上稳定（numerically stable）的计算方法呢？

前两个问题的回答当然是肯定的。我们的课题，虽然止此只是用几何的术语来表述，但它恰恰是**关于一个用最小二乘法解超定方程组问题**。向量 b 表示由一系列的实验和调查所给出的数据，由于这些实验或调查包含有不少的误差，以致在给定的子空间中不可能找到这组数据。换句话说，我们不能把 b 表示成子空间 S 中的一个向量，因为我们所遇到的方程组是不相容的，因此是无解的。这样一来，最小二乘法就选择出点 p 作为最佳选择。这个应用的重要性自然是不容置疑的*。

第二个问题，即：寻求确定点 p 的解析公式的问题，当子空间是一条直线时是很容易的。在这一节和下一节中，我们将用几种不同的方法把一个向量投影到另一个上去，而且把这种射影与早先所

* 在经济和统计中称之为回归分析。

说的内积与夹角的关系问题联系起来。所幸的是，在投影到一个高维子空间时，只要这个子空间是由一组基所给出的，关于p点的公式则仍然保持有简单的形式。这当然也是最重要的情形。它相应于多参数的最小二乘问题。这将在§3.2中去解决。这样还剩下两种可能性要特别加以注意：

(a)如果S是由一个张成它的向量组来描述，但这个向量组是线性相关的。这种条件的放宽导致了确定p点公式的失效。虽然点p作为距b最近的点仍然是唯一确定的，但是，作为一组线性相关生成元的组合它可用不同的方式来表示。于是为把它表为一种特殊的组合，就要求有一种进一步的法则。而这种法则引导我们在§3.4中引出矩阵的广义逆矩阵来。

(b)假定描述S的向量组不仅是线性无关的，而且相互正交，在这种非常有利的情形中，关于p点的公式变得特别简单—— 它实际上归为在一条直线上射影这种简单的情形，而且数值计算也同样变得简单了。这个事实提供了如下的想法：应该预先准备一组基，使得它的元素是两两正交的。任何一组基都可转换成一组正交基，在§3.3中将描述这个简单的"Gram-Schmidt过程"它可实现这个正交化。

剩下的只需回答第三个问题了，即：最小二乘逼近是否可以做到数值稳定？由于下列的理由可知，这个问题不是那么容易的：子空间S是由一组张成它的向量来刻划的，如果这些向量非常接近于线性相关，那么在数值上确定它们是否相关，事实上是不可能的。换句话说，S的维数（无关向量的个数）是很不稳定的，从而使得广义逆矩阵和点p本身也是不稳定的。在少数特殊情形中，§3.2的"正规方程"是求p的最简单的方法（而Gram-Schmidt正交化或者§3.4中的奇异值分解则是最可靠的）。

内积和Schwarz不等式

现在我们再回到内积和夹角的讨论上来。读者将很快就会看到

不是夹角本身而是**夹角的余弦**与内积更直接地联系着。因此，为了找出这种关系，先回顾一下三角学，也就是二维的情形。（见图3.2）设α是向量a与x轴的夹角。由于$\|a\|$是向量a也就是三角形OaQ的斜边的长度，因此角α的正弦和余弦分别是

$$\sin\alpha=\frac{a_1}{\|a\|}\qquad \cos\alpha=\frac{a_2}{\|a\|}.$$

这个事实对b及它的相应夹角β也是对的；正弦是$b_2/\|b\|$而余弦是$b_1/\|b\|$。现在，因为θ角就是$\beta-\alpha$，它的余弦可由三角恒等式得出：

$$\cos\theta=\cos\beta\cdot\cos\alpha+\sin\beta\cdot\sin\alpha=\frac{a_1b_1+a_2b_2}{\|a\|\cdot\|b\|} \tag{1}$$

在这个公式中的分子恰是a与b的内积，从而给出我们所寻求的关系：

3 A 任何两个向量之间夹角的余弦是

$$\cos\theta\frac{a^Tb}{\|a\|\cdot\|b\|} \tag{2}$$

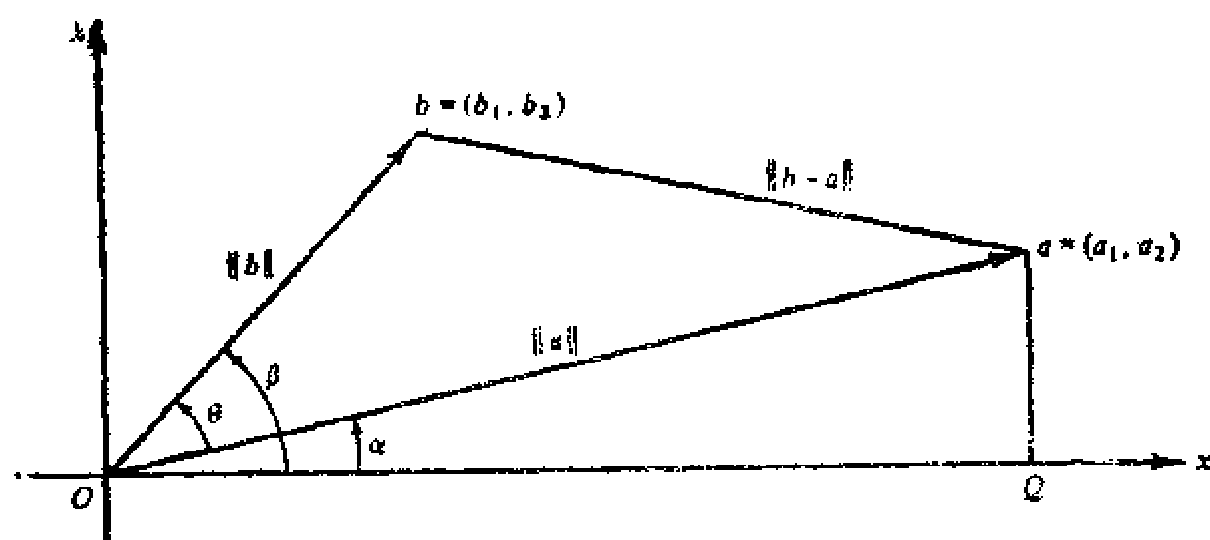


图 3.2

请注意，这个公式当 b 相差一个非零常数倍时仍是正确的：如果 b 的长度扩大一倍，则分子和分母都扩大一倍，因此余弦值不变。另一方面，改变 b 的符号，则$\cos\theta$的符号随之改变，因此夹角改变 $180°$。

注：在三角学中还有一个定理，余弦定理，它也直接推出相同的结果。它不如(1)中的公式那样不易忘记，但是它与任意三角形三边的长度相联系：

$$\|b-a\|^2=\|b\|^2+\|a\|^2-2\|b\|\cdot\|a\|\cdot\cos\theta \qquad (3)$$

当 θ 是直角时，重新得到勾股定理。但是不管 θ 角如何，表达式 $\|b-a\|^2$总可表为$(b-a)^T(b-a)$的形式，于是(3)式成为

$$b^Tb-2a^Tb+a^Ta=b^Tb+a^Ta-2\|b\|\cdot\|a\|\cos\theta$$

消去方程中两边都出现的项，读者就重新看到关于余弦的公式(2)。事实上这就证明了 n 维空间中的余弦定理，因为我们仅须涉及平面三角形Oab。

现在我们希望找到射影点 p。这个点必定是给定向量 a 的某个倍数 $p=\bar{x}a$，因为在这条直线上的每个点都是 a 的倍数，因此问题在于计算这个系数 $\bar{x}$。为此我们所需要的全部就是下述几何事实：b 与最近点 $p=\bar{x}a$的连线垂直于向量 a：

$$(b-\bar{x}a)\perp a,\text{或者}a^T(b-\bar{x}a)=0\text{，或者}\bar{x}=\frac{a^Tb}{a^Ta}.$$

3B 点 p 在由向量 a 张成的直线上的射影 p 由下列公式给出

$$p=\frac{a^Tb}{a^Ta}a \qquad (4)$$

由这点到此直线的距离（的平方）是

$$\left\|b-\frac{a^Tb}{a^Ta}a\right\|^2=b^Tb-2\frac{(a^Tb)^2}{a^Ta}+\left(\frac{a^Tb}{a^Ta}\right)^2a^Ta$$

$$=\frac{(b^Tb)(a^Ta)-(a^Tb)^2}{(a^Ta)} \qquad (5)$$

这使我们能重画图3.1，并且列入关于P点的正确公式（图3.3）。

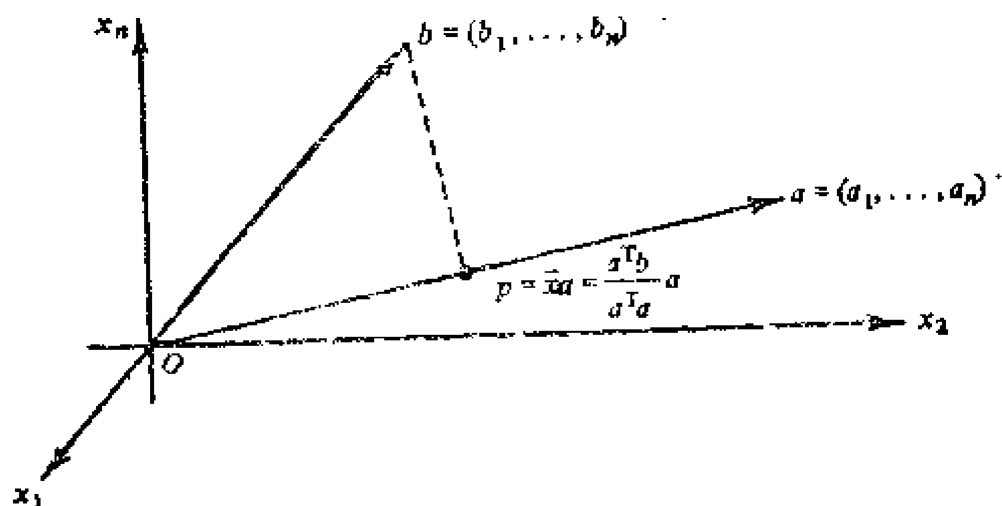


图 3.3

这个公式有一个值得注意的推论，它大概是数学中最重要的不等式（它包含著名的有关算术平均值和几何平均值的不等式为内容的，它也等价于所谓三角不等式，见练习3.1.1）。这个结果本身看上去差不多是关于一个点到一条直线的距离，也就是b到$\bar{x}a$之间距离的公式（5）的一个附带的推论。这个距离以及这个距离的平方肯定大于或等于零。于是，（5）的分子必定是非负的：$(b^Tb)(a^Ta)-(a^Tb)^2\geqslant 0$。如果在两边都加上$(a^Tb)^2$，然后取平方根，结论可改写为下列形式：

3C 任何两个向量都满足Schwarz不等式

$$|a^Tb|\leqslant\|a\|\cdot\|b\| \qquad (6)$$

注：按照公式（2），Schwarz不等式两边之比恰是$|\cos\theta|$。因为所有余弦值都在区间$[-1, 1]$之内：$-1\leqslant\cos\theta\leqslant+1$，这就给出（6）式的另一个证明——而且在某种意义下是更容易理解的证明，因为余弦是非常熟知的，但是我们强调我们的证明之简明性，它只相当于对方程（5）作机械运算。（5）式左边的表达式非负，而且甚至当今后我们对向量的长度和内积引入某些新的可能性时，它仍保持非负。于是（5）的右边的表达式也是非负的，从而不用任何三角

知识，Schwarz不等式就被证明了*。

最后，还应该看出：(6)式中的等号成立当且仅当 b 是 a 的倍式。在这种情况下，b 与 p 点重合，从而点与直线间的距离(5)是零。

矩阵的转置

现在我们转而讨论转置。到目前为止，A^T是被直接定义为将A沿主对角线作反射而得的：A的行变成A^T的列，而A的列变成A^T的行。换句话说，A^T的第 i 行第 j 列元素是A的 (j, i) 元素：

$$(A^T)_{ij}=(A)_{ji} \tag{7}$$

转置有一种更深刻的含意，它来源于它与内积的密切联系。事实上，这种联系可被用来给出转置的一个新的而且很抽象的定义：

3D 转置A^T可以由下列性质来确定：Ax与y的内积等于 x 与A^Ty的内积。形式上，这直接表示为

$$(Ax)^Ty=x^TA^Ty=x^T(A^Ty) \tag{8}$$

这个定义有两个含意：

(i)它告诉我们，当用其它的方式来定义内积时，转置应该怎样变动。这一点在复数情形中具有重大意义；这种新的内积将在§5.5中给出。

(ii)它使我们可以不经过对A和B的各个元素的所有下标进行讨论而直接计算乘积AB的转置。这个法则完全等价于逆矩阵的熟知的法则$(AB)^{-1}=B^{-1}A^{-1}$。

3E AB的转置是这些转置按相反次序的乘积：

$$(AB)^T=B^TA^T \tag{9}$$

证 按照3D，$(AB)x$与y的内积等于x与$(AB)^T\cdot y$的内积。另一方面，它也是$A(Bx)$与y的内积，由3D，它又等于Bx与A^Ty的内积，再利用3D，它也是x与B^TA^Ty的内积。比较一下这些等式，

* 这个不等式$|a^Tb|\leqslant\|a\|\cdot\|b\|$也叫Cauchy不等式。苏联人甚至称之为Cauchy-Schwarz-буняковский不等式。数学史家们看来也同意这种观点。

我们发现$(AB)^T=B^TA^T$、或许读者还需要一个具体的例子：

$$AB=\begin{bmatrix}1&4\\0&3\end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix}0&1&1\\2&0&1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}8&1&5\\6&0&3\end{bmatrix}$$

而

$$B^TA^T=\begin{bmatrix}0&2\\1&0\\1&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&0\\4&3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}8&6\\1&0\\5&3\end{bmatrix}.$$

还有一种矩阵也是为我们所需要的。对于到一条直线上的射影，数a^Ta出现在分母中。而对于到一个子空间的射影，这个数就变成了一个矩阵A^TA——而它的秩是可以事先确定的。

3F 对任何秩r的$m\times n$矩阵，乘积A^TA是一个对称矩阵，而且它的秩仍为r。

记住：**对称矩阵是一个等于它的转置的矩阵。**我们按法则(9)来计算A^TA的转置：

$$(A^TA)^T=A^T(A^T)^T \tag{10}$$

但是当我们把矩阵转置两次时，又重新回到A。因此，(10)式的右端就是A^TA，从而这个等式说明A^TA等于它的转置，换句话说，A^TA是对称的。

为求出它的秩，我们将证明A与A^TA有相同的核。于是由于秩加上核的维数总等于列数——$r+(n-r)=n$，而且A与A^TA都有n列——这就直接推出这两个矩阵的秩是相同的。首先，若x在A的核中，则$Ax=0$且$A^TAx=A^TO=0$，所以x也在A^TA的核之中。为证另一半，先设$A^TAx=0$，取它与x的内积：

$x^TA^TAx=0$，或者$\|Ax\|^2=0$，或者$Ax=0$。

从而x在A的核之中：这两个核是相同的。

有一种最一般，最重要的特殊情形，即当A的列向量组线性无关时，从而秩为$r=n$时，则按照3F，$n\times n$矩阵A^TA的秩也是n，从而它必定是可逆的。

3G 如果A有线性无关的列向量组，使得$r=n$，则A^TA是一个

对称可逆方阵。

给一个简单的例子：

$$若\quad A=\begin{bmatrix}1 & 4\\ 2 & 0\\ 3 & 1\end{bmatrix},\quad 则A^TA=\begin{bmatrix}14 & 7\\ 7 & 17\end{bmatrix},$$

这两个矩阵都有无关的列向量组，秩都为2，而且核均为零子空间。

练习3.1.1 (a) 任给两个正数x和y，作向量$b=(\sqrt{x},\sqrt{y})$，并取$a=(\sqrt{y},\sqrt{x})$，利用Schwarz不等式比较x和y的算术平均值与它们的几何平均值的大小。

练习(b) 设我们有一个从原点到点x的向量，再加上一个由x出发长度为$\|y\|$的向量$x+y$，三角形的第三边直接由原点到$x+y$连结而成，三角不等式断言：这个距离不大于前两者之和。

$$\|x+y\|\leqslant\|x\|+\|y\|$$

两边平方之后进行化简，由此推出Schwarz不等式。

练习3.1.2 对图3.3中的三角形Obp，使用(5)式来求bp的长度，从而验证勾股定理。

练习3.1.3 在连接原点与$a=(1,1,1)$的射线上求一点p，使之距点$b=(2,4,4)$最近。同样地，在过b的射线上求距a最近的点。

练习3.1.4 解释一下为什么当a，b同时在一条过原点的直线上，且仅在这种情况下，Schwarz不等式成为等式。如果它们分别位于原点的两边又如何？

练习3.1.5 在n维空间中，向量$(1,1,\cdots,1)$与各个坐标轴的夹角是什么？

练习3.1.6 如果把a和b事先化为单位向量的话，Schwarz不等式还有另一个证明：

$$|a^Tb|=\left|\sum a_jb_j\right|\leqslant\sum|a_j|\,|b_j|\leqslant\sum\frac{|a_j|^2+|b_j|^2}{2}$$

$$=\frac{1}{2}+\frac{1}{2}=\|a\|\cdot\|b\|$$

请验证中间的步骤。

练习3.1.7 通过把$AA^{-1}=I$转置，我们发现逆矩阵的转置等于转置的逆矩阵：$(A^{-1})^T=(A^T)^{-1}$。证明：若A对称，则A^{-1}也是对称的。

练习3.1.8 构造2×2对称矩阵A和B，使得它们的乘积不是对称的。注意若A和B可交换，则乘积仍是对称的：$(AB)^T=B^TA^T=BA=AB$。

练习3.1.9 若A的秩为r，则矩阵A^T（行秩=列秩）。A^TA（由3F）和AA^T（3F应用于A^T）的秩也都是r。给出一个例子来说明既使当A^TA是可逆的，AA^T完全可能不是可逆的。

练习3.1.10 甲烷分子CH_4排列成如下形式：碳原子位于一个正四面体的中心，而四个氢原子位于顶点上。如果顶点位于(0,0,0)，(1，1，0)，(1，0，1)，和(0，1，1)——注意所有的6条棱的棱长都等于$\sqrt{2}$，所以四面体是正四面体——那么，过中心$\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$和顶点的连线之间的夹角是多少？（键角本身大约是109.5°，这是化学家们早已熟知的了。）

§3.2 到子空间上的射影和最小二乘逼近

到现在为止，一个线性方程组$Ax=b$可能有解也可能无解。如果b不在列空间$\mathscr{R}(A)$中，则方程组是不相容的，从而Gauss消去法将失效。在m（$m>1$）个一元方程组成的方程组的情形中差不多都出现这种情况。例如：联立方程组

$$\begin{aligned}2x&=b_1\\3x&=b_2\\4x&=b_3\end{aligned}\tag{11}$$

仅当右边的b_i成2:3:4的比例时才有解。这个解x若存在当然是唯

一的，但是仅当 b 与向量$a=(2, 3, 4)^T$在同一直线上时才存在。

尽管不相容方程不可解，但在实践中仍然存在而且必须去解它。一种办法是由方程组的一部分方程去确定 x，而把其余的略去。当所有m个方程来源于相同的出处时，这样做难以证明是合理的。与其期望某些方程没有误差而其余方程有很大误差，不如如下选取 x 更有道理，即取 x 使得m个方程的平均误差最小。有很多不同的方法来规定这样一个平均值，但最方便的是使用平方和

$$E^2=(2x-b_1)^2+(3x-b_2)^2+(4x-b_3)^2 \tag{12}$$

若存在精确解$ax=b$，则误差的极小值为$E=0$。在 b 与 a 不成比例的一般情形中，函数E^2是一条抛物线，它的极小值在满足下述条件的点达到

$$\frac{dE^2}{dx}=2[(2x-b_1)2+(3x-b_2)3+(4x-b_3)4]=0 \tag{13}$$

解出 x，方程组$ax=b$的最小二乘解是

$$\bar{x}=\frac{2b_1+3b_2+4b_3}{2^2+3^2+4^2}=\frac{2b_1+2b_2+4b_3}{29} \tag{14}$$

对于任给$a\neq 0$及任何 b，不难找出一般公式来。首先，误差E不是别的，恰是向量$ax-b$的长度，

$$E=\|ax-b\|=[(a_1x-b_1)^2+\cdots+(a_mx-b_m)^2]^{\frac{1}{2}} \tag{15}$$

平方一下，于是抛物线是

$$E^2=(ax-b)^T(ax-b)=a^Tax^2-2a^Tbx+b^Tb \tag{16}$$

它在满足下列条件的点有极小值

$$\frac{dE^2}{dx}=2a^Tax-2a^Tb=0$$

3H 关于一个未知数的课题$ax=b$的最小二乘解是

$$\bar{x}=\frac{a^Tb}{a^Ta} \tag{17}$$

几何上看，这个解与射影是重合的：$p=\overline{x}a$ 是 a 的直线上距 b 最近的点。

读者看到，我们又一次回到最小二乘问题的几何解释——距离的极小化。事实上，用微分(16)式中的抛物线 E^2，并且令导数趋于0，我们已经用微积分来证实前一节的几何问题：连结 b 和 p 的直线必定垂直于 a 方向的直线，从而这就给出正确的 $\overline{x}$：

$$a^T(b-\overline{x}a)=a^Tb-\frac{a^Tb}{a^Ta}a^Ta=0 \tag{18}$$

作为一个次要的注，我们注意到退化的情形：$a=0$，a 的一切倍数都是零，从而这条直线仅是一个点。于是 b 到 a 上的射影就是 $p=0$。但是关于 $\overline{x}$ 的公式(17)变成无意义的 $0/0$，从而正确地反映了倍数 $\overline{x}$ 成为完全不确定的这个事实。事实上，x 的所有值给出相同的误差 $E=\|0x-b\|$，所以 E^2 是一条水平直线而不再是抛物线，从而不存在唯一的极小值点 $\overline{x}$。在§3.4中引入广义逆的目的之一是对 $\overline{x}$ 指定某个确定的值：在这种情形下将指定 $\overline{x}=0$，它看起来至少比其它任何数更"对称"些。

练习3.2.1 假设我们在四个不同的场合观察一个病人的重量，其结果是 $b_1=150$ $b_2=153$ $b_3=150$ $b_4=151$，问在最小二乘意义下，我们可认定的体重最佳值是多少？

练习3.2.2 对 $3x=10$，$4x=5$ 求最小二乘解。

多变元的最小二乘问题

现在我们进一步，把 b 射影到一个子空间上，而不是一条直线上。这个几何问题是由下列方式产生的。假设我们仍由一个方程组 $Ax=b$ 开始，但这一次 A 是一个 $m\times n$ 矩阵——代替只允许一个未知量，即一个列向量 a 的情形，这个矩阵有 n 列。我们将仍设想观察的次数 m 大于未知量的个数 n，所以不得不设想方程组 $Ax=b$ 不相容。**大概将不存在x的这样一种选择，使与已知数b完全相应，换句**

话说，大概b将不是A的列向量的线性组合。

问题仍旧是选取$\overline{x}$使误差极小，而且这个极小化是在最小二乘的意义下来做的。这个误差是$E=\|Ax-b\|$而且它恰是b到A的列空间中的点Ax的距离(Ax是列向量用系数$x_1, x_2, \cdots, x_n$作成的线性组合)。于是寻求使误差E极小的最小二乘解就相当于寻求一点$p=A\overline{x}$使之比列空间中任何其它的点距b都更近一些。

我们可以用几何方法也可用微积分来确定$\overline{x}$，但我们更愿意用几何的方法：p必定是“b到列空间的射影”，而且**误差向量$A\overline{x}-b$必定垂直于上述空间**（图3.4）。垂直于一个空间可如下来表述：A的列空间中的每个向量是列向量组的一个线性组合，其组合系数为y_1，…，y_n。换句话说，它是一个形如Ay的向量。对于y的所有可能的选择，平面上的这些向量必定垂直于误差向量$A\overline{x}-b$：

$$(Ay)^T(A\overline{x}-b)=0\text{或}y^T(A^TA\overline{x}-A^Tb)=0 \qquad (19)$$

这个式子对每个y都成立，要达到这一点只有一个办法，也就是：括号中的向量必为零向量，$A^TA\overline{x}-A^Tb=0$。几何理论已为我们正确地导出最小二乘理论的基本方程：

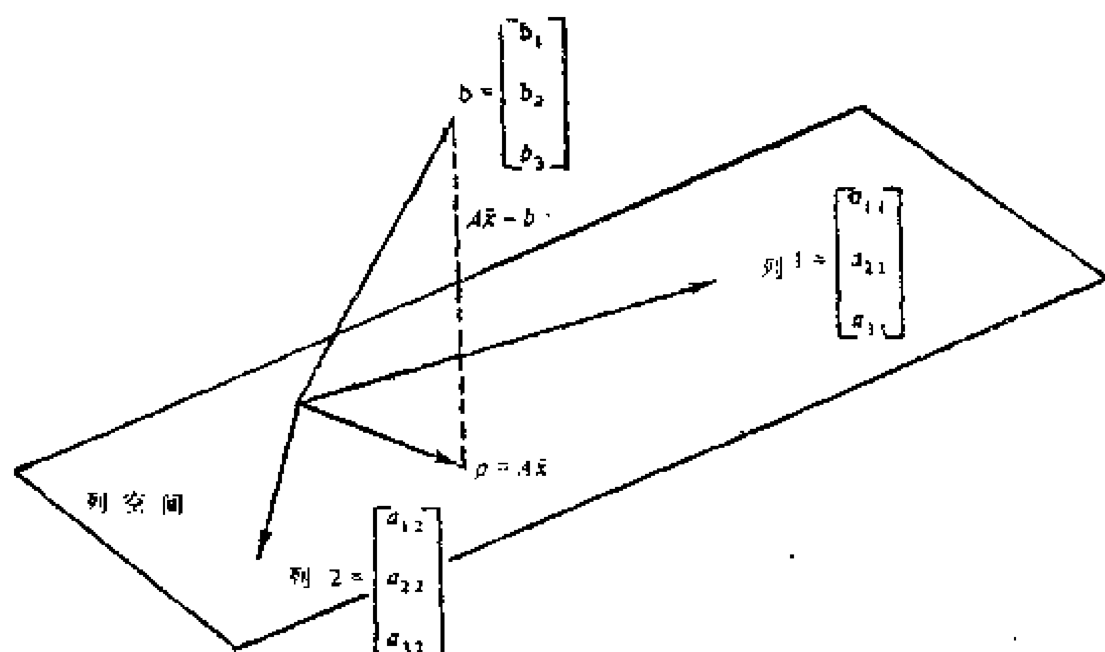


图 3.4

3I　一个n个未知数m个方程的不相容方程组$Ax=b$的最小二乘解满足

$$A^TA\overline{x}=A^Tb \qquad (20)$$

这就是所谓“正规方程”。如果A的列向量组是线性无关的，则由3G，矩阵A^TA是可逆的，从而，唯一的最小二乘解是

$$\overline{x}=(A^TA)^{-1}A^Tb \qquad (21)$$

于是b到列空间的射影是

$$p=A\overline{x}=A(A^TA)^{-1}A^Tb \qquad (22)$$

出现在(21)式中的矩阵$B=(A^TA)^{-1}A^T$($\overline{x}=Bb$)是A的左逆矩阵之一：$BA=(A^TA)^{-1}A^TA=I$。这样一个左逆矩阵的存在是由定理2Q的唯一性部份所保证，因为A的列向量组是线性无关的。

我们选取一个数字的例子，对它我们既可利用我们的直觉，又可利用公式(22)。假设矩阵A和向量b如下给定：

$$A=\begin{bmatrix}1&2\\1&5\\0&0\end{bmatrix} \qquad b=\begin{bmatrix}4\\3\\9\end{bmatrix}$$

因为这两个列向量都以零为结尾，A的列空间很容易被确定下来：这个列空间就是三维空间的x-y平面。b到这个平面的射影将不改变其x，y分量，它们分别是4和3，但是z分量变成零，从而$p=(4, 3, 0)^T$。这个事实也可用公式(22)来证实：

$$A^TA=\begin{bmatrix}1&1&0\\2&5&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&2\\1&5\\0&0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2&7\\7&29\end{bmatrix},$$

$$(A^TA)^T=\frac{1}{9}\begin{bmatrix}29&-7\\-7&2\end{bmatrix}$$

$$p=\begin{bmatrix}1&2\\1&5\\0&0\end{bmatrix}\cdot\frac{1}{9}\begin{bmatrix}29&-7\\-7&2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&1&0\\2&5&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}4\\3\\9\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}4\\3\\0\end{bmatrix}。$$

我们也可直接考察不相容方程组

$$u+2v=4$$
$$u+5v=3$$
$$0u+0v=9$$
在这种情形下，我们所能做的最好选择是解前两个方程（给出$\overline{x}$的分量$\overline{u}$和$\overline{v}$）而略去第三个方程，这个方程的误差永远是9。

注意，当b实际上位于列空间中时，它就可表为列向量组的一个组合$b=Ax$，于是射影简化为
$$p=A(A^TA)^{-1}A^TAx=Ax=b,$$
显然，最近点p就是b本身。

另一种极端的情形是向量b与A的所有列向量都正交。在这种情形下，b不仅不在这个子空间中，它实际上还与这个子空间垂直。这样的几何事实告诉我们：子空间中的最近点就是它的原点，b沿这个子空间的分量为零，所以它的射影为$p=0$。这个结论当我们计算$\overline{x}$时也可被证实：A的列向量组就是A^T的行向量组，而且当b与它们都正交时，一定有$A^Tb=0$。于是
$$\overline{x}=(A^TA)^{-1}A^Tb=0 \qquad \text{从而} p=A\overline{x}=0。$$

对射影到一条直线上的特殊情形验证一下这个公式也是有意义的：我们重新得出早先的公式(17)。这时A成为一个列向量a，A^TA是一个数a^Ta，而(21)式中的$\overline{x}$恰是我们所期望的a^Tb/a^Ta。

练习3.2.3 使用正规方程，求下列不相容方程组在最小二乘意义下的最佳解：
$$\begin{bmatrix}1&0\\0&1\\1&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}u\\v\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1\\1\\0\end{bmatrix}$$
同样地，求解方程组$x=1$，$x=3$，$x=5$或
$$\begin{bmatrix}1\\1\\1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1\\3\\5\end{bmatrix}$$

练习3.2.4 （a）令

$$A=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\\ 1 & 1\end{bmatrix} \quad x=\begin{bmatrix}u\\ v\end{bmatrix} \quad b=\begin{bmatrix}1\\ 3\\ 4\end{bmatrix}.$$

记$E^2=\|Ax-b\|^2$，且令它关于u，v的导数趋于零，比较一下所得方程与$A^TA\overline{x}=A^Tb$，从而证实微积分与几何一样可用来推导正规方程。这些方程直接来源于E^2的极小化。

(b)求出解$\overline{x}$以及b在列空间上的射影$p=A\overline{x}$。

(c)验证$b-p$垂直于A的列空间。

射影矩阵

我们的计算已经证明了距b最近的点是$p=A(A^TA)^{-1}A^Tb$。这个公式用矩阵的术语表示出由b到A的列空间的垂线这种几何结构。描述这种结构的矩阵叫做**射影矩阵**，用P来表示：

$$P=A(A^TA)^{-1}A^T \tag{24}$$

这个矩阵将任何向量b射影到A的列空间*。换句话说，$p=Pb$是b在列空间中的分量，而误差$b-Pb$则是它在正交补中的分量（或者，自然也可以说$I-P$是一个射影矩阵，它把b射影到正交补上，而射影是$(I-P)b=b-Pb$。）。简言之，我们有了一个把一个向量分解为两个互相垂直的分量的矩阵公式：Pb在列空间$\mathscr{R}(A)$中，而另一个分量$(I-P)b$在左核$\mathscr{N}(A^T)$之中，而它就是列空间的正交补。

这些射影矩阵既可用几何观点也可用代数观点来解释。它们是一类具有十分特殊性质的矩阵，而且事实上，以后它们将被用来作为所有对称矩阵的基本"构件"。因此，在转到对最小二乘法的应用之前，我们先来叙述它的性质：

3J 射影矩阵$P=A(A^TA)^{-1}A^T$有两个基本性质：

(i)它是幂等的：$P^2=P$

---

* 这存在着与置换矩阵（它也用P来表示）发生混淆的危险。但这种危险是很小的，因为我将决不让这两者同时出现。

(ii)它是对称的：$P=P^T$

反之，任何具有这两个性质的矩阵都是一个到 P 的列空间上的射影矩阵。

证 从几何角度容易看出为什么$P^2=P$。这是因为如果我们由任意的 b 开始，向量Pb位于所射影到的子空间中。于是，当我们再一次射影，作出$P(Pb)=P^2b$时，因为Pb已在此子空间中，所以它不再改变，这就证明了对任何 b，都有$P^2b=Pb$。从代数角度看，由下式可推出相同的结论：

$$P^2=A(A^TA)^{-1}A^TA(A^TA)^{-1}A^T=A(A^TA)^{-1}A^T=P.$$

为证明 P 是对称的，我们按相反的次序乘转置阵，并对$B=A^TA$使用练习3.1.7中证明的恒等式$(B^{-1})^T=(B^T)^{-1}$：

$$P^T=(A^T)^T((A^TA)^{-1})^TA^T=A((A^TA)^T)^{-1}A^T$$
$$=A(A^TA)^{-1}A^T=P$$

为给出一个几何的证明，任取向量 b 和 c。若把 b 按通常产生Pb的方式射影到子空间中，把 c 射影到它的正交补中，做出$(I-P)C$，则这两个向量是垂直的：

$$(Pb)^T(I-P)C=b^TP^T(I-P)C=0$$

由于此式对任何 b 和 c 都对，我们可以断言

$$P^T(I-P)=0\text{或}P^T=P^TP\text{或}P=(P^TP)^T=P^TP$$

于是$P^T=P$，即：P 是对称的。

为证其逆，我们必须由这两个条件推出 P 是到它的列空间的射影矩阵。这个列空间由 P 的列向量组的所有线性组合Pc所组成。对任何向量 b，向量Pb当然在这个空间中这是因为由矩阵乘法法则，Pb是 P 的列向量组的一个组合。于是，我们可以证明：误差 $b-Pb$ **与这个子空间正交**：对这个空间中任何向量Pc，性质(i)和(ii)蕴含着

$$(b-Pb)^TPc=b^T(I-P)^TPc=b^T(P-P^2)c=0 \qquad (25)$$

因为$b-Pb$与此空间正交，所以这就是我们所要的垂线，从而 P 是射影。

练习3.2.5 设给定三维空间的子空间 S 的一组基 u_1，u_2，以及 S 之外的一个向量 b：

$$u_1=\begin{bmatrix}1\\1\\0\end{bmatrix},\qquad u_2=\begin{bmatrix}1\\0\\1\end{bmatrix},\qquad b=\begin{bmatrix}0\\2\\1\end{bmatrix}$$

通过构造一个以 u_1，u_2 为列向量组的矩阵 A，求出关于子空间 S 的射影矩阵 P。计算 b 到 S 上的射影和它在正交补 $S^{\perp}$ 上的射影。

练习3.2.6 证明若 P 是一个射影矩阵，使得它有性质(i)和(ii)，则 $I-P$ 也有这些性质。

练习3.2.7 若 P 是到 x-y 平面内一条直线上的射影，画一个图来描述"反射矩阵" $H=I-2P$ 的作用。从几何上和代数上分别解释为什么 $H^2=I$。

练习3.2.8 证明：若 u 是单位向量，则秩一矩阵 $P=uu^T$ 是一个射影矩阵：它有性质(i)和(ii)。选取 $u=a/\|a\|$，P 成为到 a 张成的直线上的射影，且 Pb 是点 $p=\bar{x}a$：秩一的射影恰恰对应着一个未知量的最小二乘问题。

练习3.2.9 把 x-y 平面射影到 y 轴上的 2×2 矩阵是什么？

数据的最小二乘处理

设我们做一系列试验，而且期望输出量 y 最好是输入量 t 的线性函数，$y=C+Dt$。例如：

(1)每隔一段时间，我们测量一下到一个飞往火星的卫星的距离。在这种情况下，t 是时间，y 是距离，而且排除发动机仍在工作或者重力太大因素，这个卫星应是以近乎常值的速度 V 在运动：$y=y_0+Vt$

(2)我们可以改变加在一种结构上的负载，并测量由此而产生的形变。在这个试验中，t 是负载，而 y 是形变仪上的读数。排除负载过大，使得材料变得可塑外，按弹性理论，将保持线性关系 $y=C+Dt$。

(3)在经济和商业中，生产成本、生产量、价格和利润之间存

在着复杂的联系。尽管如此，在一定的范围内，它们的联系可能接近于线性的。例如：印制t_1本杂志的成本是y_1；而在下一周中，印制t_2本的成本为y_2，如此等等。于是，出版商可以假定$y=C+Dt$，再用已有的数据来估计C和D，由此来预测未来一周中它的成本。系数D——每加印一本的消耗，或者称为限界生产成本（marginal production cost），常常比间接成本（overhead cost）C更能评价它的决策。

现在的问题是如何由这些试验的结果来计算系数C和D？如果关系真是线性的，且也没有试验误差，则毫无疑问：在不同t值上两次试验值y将决定一条直线$y=C+Dt$，而且所有进一步试验的值都将位于此直线上。若有误差，从而添加的点便落在这直线的两侧，则必须准备"平均"所有的试验，而且找出一条估计的直线——请不要把它与在前面几页中我们把b射影到其上的直线相混淆。事实上，因为有两个未知数C和D需被确定，我们将涉及一个到二维子空间上的射影。最小二乘问题直接由下列试验结果来得出：

$$\begin{aligned} C+Dt_1&=y_1\\ C+Dt_2&=y_2\\ &\vdots\\ C+Dt_m&=y_m \end{aligned} \tag{26}$$

这是一个超定方程组，而且若存在误差的话，它将是无解的。我们强调指出：未知向量x有两个分量C和D：

$$\begin{bmatrix} 1 & t_1\\ 1 & t_2\\ \vdots & \vdots\\ 1 & t_m \end{bmatrix}\begin{bmatrix} C\\ D \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} y_1\\ \vdots\\ y_m \end{bmatrix} \text{或} \qquad Ax=b \tag{27}$$

最小二乘意义下的最佳解就是使这些误差的平方和达到极小的向量。我们选取$\overline{C}$和$\overline{D}$，使得

$$E^2=\|b-Ax\|^2=(y_1-C-Dt_1)^2+\cdots+(y_m-C-Dt_m)^2$$

达到极小。用矩阵的语言来说，我们选取$\bar{x}$使得点$p=A\bar{x}$距 b 点尽可能地近。在所有的形如$y=C+Dt$的直线中，我们来选择一条，使之与所给的数据最为吻合（图3.5）。在图中，误差是到此直线的垂直距离$y-C-Dt$。正是这些距离被平方。求和并极小化了。

例 下列数字给出四次试验结果（图3.5）：当$t=0$时，$y=0$，当$t=1$时，$y=1$，

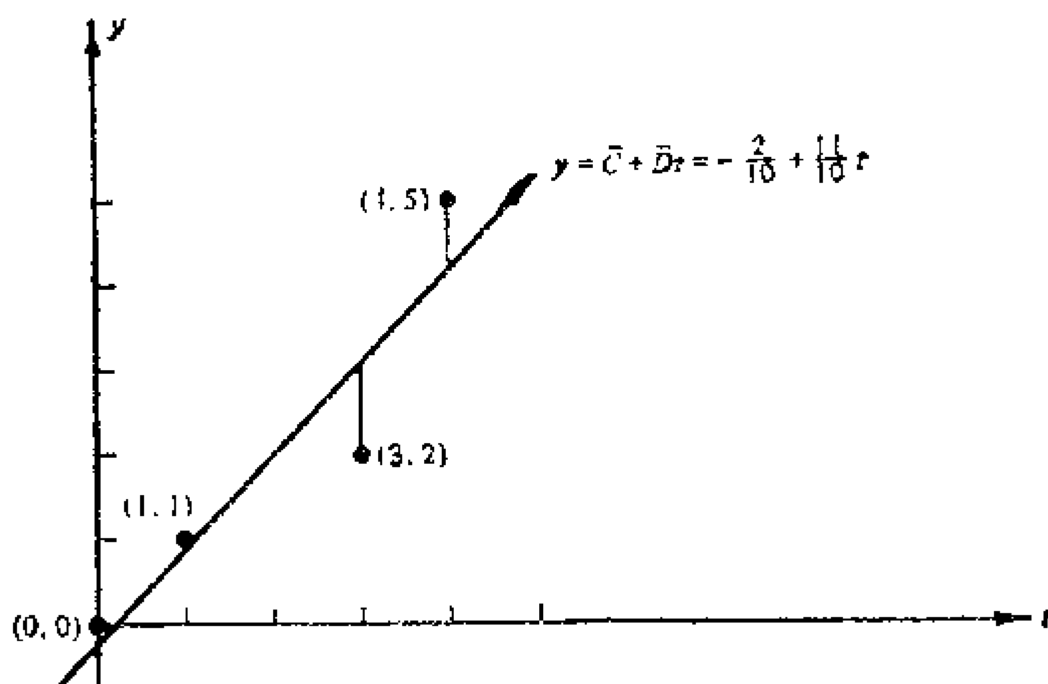


图 3.5 直线逼近

当 $t=3$ 时，$y=2$，　　当 $t=4$ 时，$y=5$。

注意：t 值的选取并不要求是等间隔的，试验者可以选取任何方便的值（如果试验允许取负值的话，也可以是负值）而不受数学形式的任何影响。相应的方程组是

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 3 \\ 1 & 4 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \\ 5 \end{bmatrix}$$

我们需要作出A^TA及其逆：

$$A^TA=\begin{bmatrix}4 & 8\\ 8 & 26\end{bmatrix}\qquad (A^TA)^{-1}=\frac{1}{20}\begin{bmatrix}13 & -4\\ -4 & 2\end{bmatrix}$$

于是最小二乘解$\overline{x}=(A^TA)^{-1}A^Tb$由下式给出：

$$\overline{x}=\begin{bmatrix}\overline{C}\\ \overline{D}\end{bmatrix}$$

$$=\frac{1}{20}\begin{bmatrix}13 & -4\\ -4 & 2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 1 & 1 & 1\\ 0 & 1 & 3 & 4\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\ 1\\ 2\\ 5\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-\frac{2}{10}\\ \frac{11}{10}\end{bmatrix}$$

最佳直线为$y=-\frac{2}{10}+\frac{11}{10}$。

注：我们用直线来吻合数据与最小二乘法本身并没有什么特殊的关系。在许多试验中，没有理由期望存在一种线性关系。而且寻求这种关系将是徒劳的。例如：假定我们测定某种放射性材料。输出值y是Geiger（盖格）计数器在不同时间t的读数。如果我们知道这种材料是两种放射性元素的混合物，而且还知道这两种元素的半衰期（或衰减率）但是不知道在这种材料中它们各占多大的比例。如果这两个未知量分别是C和D，则盖格计数器的读数将类似于两个指数的和[*]（而不像是一条直线）：

$$y=Ce^{-\lambda t}+De^{-\mu t}\tag{28}$$

在实践中，由于放射性是在不规则的时间间隔，以离散的量的形式发射出来，因此法则(28)不可能由计数器精确地反映出来。实际上，在不同的时刻t_1，…，t_m，我们得到读数y_1，…，y_m，而关系式(28)近似地满足：

$$Ce^{-\lambda t_1}+De^{-\mu t_1}\approx y_1$$

$$\vdots$$

* 在统计和经济中，它们相应于两种货物，分别以由Poisson定律给出的概率输出或输入。而在人口理论里，如果出生率超过死亡率，则λ和μ将是负数。

$$Ce^{-\lambda t_m}+De^{-\mu t_m}\approx y_m \qquad (29)$$

如果读数多于两个，即$m>2$，则与前一样，作为C和D的方程不能解，但是最小二乘原理将给出估计值$\overline{C}$和$\overline{D}$。

但是，如果我们知道C和D的精确值，而试图去求出衰减率λ和μ时，情况就完全不同了。这就一个非线性最小二乘问题，它的求解比线性问题要困难得多。我们仍将作出误差的平方和E^2并极小化之。但E^2不是λ和μ的二次多项式，从而令它的导数为零也给不出关于估计值$\overline{\lambda}$和$\overline{\mu}$的线性方程。在下面的练习中，我们将限于讨论线性最小二乘问题。

练习3.2.10 证明：对一组测量值y_1，…，y_m，用一条水平直线（换句话说，用一个常值函数$y=C$）得到的最小二乘意义下的最佳拟合，是它们的平均值

$$C=\frac{y_1+\cdots+y_m}{m}$$

（与练习3.2.1比较）用统计术语来说，使$E^2=(y_1-y)^2+\cdots+(y_m-y)^2$极小化的选择$\overline{y}$是样本的均值，而所得的$E^2$是均方差$\sigma^2$。

练习3.2.11 求下列测量值的最佳直线拟合，并简述解答：

当$t=-1$时$y=2$，$t=0$时$y=0$，$t=1$时$y=-3$，$t=2$时$y=-5$。

练习3.2.12 假如不用直线而改用抛物线$y=C+Dt+Et^2$来拟合上述练习中的数据。那么在由四组测量值得到的不相容方程组$Ax=b$中，系数矩阵A，未知向量x和数据向量b各是什么？不要求计算$\overline{x}$。

§3.3 正交基，正交矩阵和Gram-Schmidt正交化

在解最小二乘问题时，我们已叙述了正交性的重要性，我们也

将继续说明它的重要性。的确，正交性有一种重要性和吸引力，它比在最小二乘上的应用要深刻得多。每当我们考虑x-y平面或三维空间时，总是设想在图形中加入一组坐标轴。它们有一个参考点，称之为原点。不仅如此，**想象中构造的坐标轴总是正交的。**在给x-y平面选取一组基（这与选取一组坐标轴是一码事）时，我们总是选取一组正交基。

如果说，基的想法是把向量空间的几何和代数联系起来的关键步骤之一的话，那么就会随之想到选取一组正交基。为把每种几何上的构造变化为代数计算就需要一组基。为使这些计算简化，我们就需要一组正交基。甚至还可以进一移特殊化，它使得基成为最佳的：我们从一组两两正交的向量出发，把它们简化成单位向量组。这意味着此组中的每个向量都用它的长度来除一下，也就是用$v/\|v\|$来代替v本身。这个步骤把一组正交基化为标准正交基。

3K 一组基v_1，…，v_k称为是标准正交的，如果

$$v_i^T v_j=\begin{cases} 0 & \text{当 } i\neq j \text{ 时} \quad \text{给出正交性} \\ 1 & \text{当 } i=j \text{ 时} \quad \text{给出规范性} \end{cases} \tag{30}$$

最重要的例子是标准基。对于x-y平面或对于R^n，我们不仅考虑相互垂直的坐标轴，而且在每个轴上标出一个单位长的向量：

$$e_1=\begin{bmatrix}1\\0\\ \vdots\\0\end{bmatrix},\quad e_2=\begin{bmatrix}0\\1\\0\\ \vdots\\0\end{bmatrix},\quad \cdots\cdots,\quad e_n=\begin{bmatrix}0\\ \vdots\\0\\1\end{bmatrix}.$$

这当然是一组标准正交基，我们可以旋转整个坐标轴系而不改变它们之间的夹角，这些旋转矩阵（或正交矩阵）我们将在下面介绍。另一方面，如果我们不是考虑R^n而且考虑它的一个子空间，那么标准向量e_i完全可能位于这个子空间之外。这种情形下，是否可以寻找到一组标准正交基都是不清楚的。但是，我们将证明：这样的基总是存在的，它可以由任何一组基出发，用一种简单的方法构造出

来。这种把一组斜坐标轴化为直坐标轴的构造法．就是所谓Gram-Schmidt正交化过程。

总起来说，这一节的三个基本内容是：

（1） 当A的列向量组是标准正交组时，$Ax=b$的最小二乘解。

（2） 正交矩阵的定义和性质

（3） Gram-Schmidt正交化过程和它作为一种新的矩阵分解的解释。

射影和最小二乘法：正交情形

设A是一个$m\times n$矩阵，且设它的列向量是正交的。则这些列向量必定是线性无关的，所以已知这个列向量空间的射影矩阵和最小乘解$\overline{x}$：$P=A(A^TA)^{-1}A^T$和$\overline{x}=(A^TA)^{-1}\cdot A^Tb$。这些公式对于正交列向量的情形不仅仍然有效，而且变得极为简单，因为此时**矩阵A^TA是单位矩阵。**

3L 若A的列向量组是标准正交的，则

$$A^TA=\begin{bmatrix} -a_1^T- \\ -a_2^T- \\ \cdots\cdots \\ -a_n^T- \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_1 & a_2 & \cdots & a_n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & 1 \end{bmatrix}=I \tag{31}$$

这就直接改进了代数表达式，因为P和$\overline{x}$变为

$$P=AA^T \qquad \text{和} \qquad \overline{x}=A^Tb \tag{32}$$

当然在几何上也应同时得到改进：一个简单的代数公式当有一个简单的几何解释。当坐标轴互相垂直时，对此空间的射影就被简化为对每个坐标轴的射影（图3.6），射影矩阵成为$P=a_1a_1^T+\cdots\cdots+a_na_n^T$：

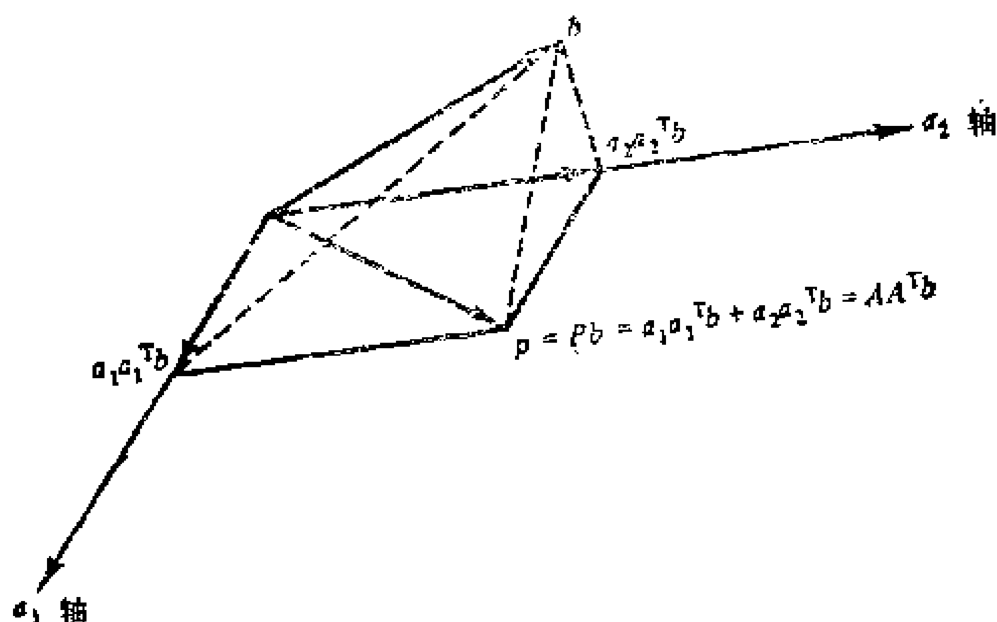


图 3.6 到一个平面的射影＝到正交的a_1和a_2射影之和

$$P=AA^Tb=\begin{bmatrix} | & | & & | \\ a_1 & a_2 & \cdots & a_n \\ | & | & & | \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_1^Tb \\ \vdots \\ a_n^Tb \end{bmatrix}=a_1a_1^Tb+\cdots+a_na_n^Tb \tag{33}$$

通常的耦合项$(A^TA)^{-1}$不出现了，而且p是n个射影的和。

现有五个方程，它们是这一章的基础，把它们收集在一起可能是有用的：

1． $Ax=b$，给定的方程，它可以是不相容的；

2． $A^TA\overline{x}=A^Tb$　关于$\overline{x}$的正规方程；

3． $P=A\overline{x}$　　b到A的列向量空间的射影；

4． $P=A(A^TA)^{-1}A^Tb$　给出$p=Pb$的射影矩阵；

5． $\overline{x}=A^Tb$和$=P=AA^T=a_1a_1^T+\cdots+a_na_n^T$ A有正交的列向量组的特殊情形。

例1　下列情形是简单的但是也是典型的：假定我们把一个点$b=(x,\ y,\ z)$射影到x-y平面上。显然它的射影是$p=(x,\ y,\ 0)$，而且它是到x轴和y轴上分别射影之和：

$$a_1=\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}\qquad 而且\ a_1a_1^Tb=\begin{bmatrix}x\\0\\0\end{bmatrix},$$

$$a_2=\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}\qquad 且\quad a_2a_2^Tb=\begin{bmatrix}0\\y\\0\end{bmatrix}$$

整个射影矩阵是

$$P=a_1a_1^T+a_2a_2^T=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&0\end{bmatrix}\quad 而且\quad P\begin{bmatrix}x\\y\\z\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x\\y\\0\end{bmatrix}。$$

例 2 存在这样一种情况，对一条直线的拟合引出正交的列向量组。如果测量值b_1，b_2和b_3是在关于 $t=0$ 对称的时刻取的值。例如，$t_1=-1$，$t_2=0$和$t_3=1$，则拟合$y=C+Dt$导出三个二元方程：

$$\begin{aligned}C+Dt_1&=b_1\\C+Dt_2&=b_2\\C+Dt_3&=b_3\end{aligned}\qquad 或\quad \begin{bmatrix}1&-1\\1&0\\1&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}C\\D\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}b_1\\b_2\\b_3\end{bmatrix}$$

这两个列向量是正交的。虽然它们还不是标准正交的，但这只需一个简单的单位化过程：除以它们各个的长度$\sqrt{3}$和$\sqrt{2}$，并把未知数换为 $c=C\sqrt{3}$ 和 $d=D\sqrt{2}$：

$$Ax=\begin{bmatrix}1/\sqrt{3}&-1/\sqrt{2}\\1/\sqrt{3}&0\\1/\sqrt{3}&1/\sqrt{2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}c\\d\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}b_1\\b_2\\b_3\end{bmatrix}$$

现在A^TA是单位矩阵，从而最小二乘解可以一看就写出来：

$$\bar{x}=A^Tb=\begin{bmatrix}(b_1+b_2+b_3)/\sqrt{3}\\(-b_1+b_3)/\sqrt{2}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\bar{c}\\\bar{d}\end{bmatrix}\tag{34}$$

换句话说，最佳直线的系数C和D是

$$C=\frac{c}{\sqrt{3}}=\frac{b_1+b_2+b_3}{3},\qquad D=\frac{d}{\sqrt{2}}=\frac{-b_1+b_3}{2}$$

现在分量C和D中的每一个都有自己的含义。C是数据的平均值或中值；它给出用水平直线的最佳拟合，而Dt则是用过原点的直线的最佳拟合。因为列向量组是正交的，这两个分离的部分的和就是用任何类型直线的最佳拟合。

注 关于一个标准正交基的特殊性质的研究常常带来一种很大的副作用：一个通常的基往往被用它所不具备的性质来描述。如果把每个基都看成标准正交基，将导致错误。对于刚刚证明的关于射影的特殊性质就是如此。在标准正交的情形，它是n个一维射影的和。直观上期望一个向量可以被改写为它沿坐标轴的分量的和，但是这依赖于这些轴的正交性。如果x轴被直线$y=x$代替，而且$(0,1)$被射影到这条直线上以及y轴上，那么这两个射影的和与原来的向量$(0,1)$就相距甚远了。

练习3.3.1 (a)写出对下述数据的关于$y=C+Dt$拟合的四个方程

$y=-4$ 当 $t=-2$，　$y=-3$ 当 $t=-1$

$y=-1$ 当 $t=1$，　$y=0$ 当 $t=2$

证明这些列向量是正交的并化成单位向量。在新的问题$Ax=b$中未知数c和d是什么？

(b)找出最佳直线，作图并写出误差E^2。

(c)用原来的两个未知数，四个方程组成的方程组来解释误差为零的事实：右边的b相应的列空间在什么地方？它的射影P是什么？

练习3.3.2 把向量$b=(0,3,0)$投影到正交向量$a_1=\left(\frac{2}{3},\frac{2}{3},-\frac{1}{3}\right)$和$a_2=\left(-\frac{1}{3},\frac{2}{3},\frac{2}{3}\right)$上去，并求出它在$a_1$，$a_2$所在平面上的射影。

练习3.3.3 求出$b=(0,\ 3,\ 0)$到$a_3=(\frac{2}{3},\ -\frac{1}{3},\ \frac{2}{3})$上的射影，把三个一维射影加起来并解释所得的结果，为什么$P=a_1a_1^T+a_2a_2^T+a_3a_3^T$等于单位阵？

正交矩阵

简单说，一个正交矩阵就是一个具有标准正交列向量组的方阵*。我们将用字母Q来表示一个正交矩阵，而且用q_1，…，q_n来表示它的列向量。我们已发现一个重要的事实，即$Q^TQ=I$，这仅仅是列向量组标准正交的另一种说法而已：

$$Q^TQ=\begin{bmatrix} — q_1^T — \\ — \\ — \\ — \\ — q_n^T — \end{bmatrix}\begin{bmatrix} | & | & | & | & | \\ q_1 & & & & q_n \\ | & | & | & | & | \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \end{bmatrix}=I \tag{35}$$

方程(35)是上面(31)的一种重复，在那里我们写为$A^TA=I$而且矩阵不一定是方的。

当Q是方阵时特殊性是什么？区别在于：一个具有无关的列向量组的方阵是满秩的，秩$r=n$，从而是可逆的；若Q^T是一个左逆，则它就是逆矩阵，换句话说，Q^T也是右逆，从而$QQ^T=I$

3M 一个正交矩阵具有下列性质：

$$Q^TQ=I\text{和}QQ^T=I\text{和}Q^T=Q^{-1} \tag{36}$$

按照正交矩阵的要求，Q有标准正交的列向量组，不仅如此，而且它的行向量组也是标准正交的。换句话说，如果Q是一个正交矩阵，则Q^T也是正交矩阵。

后面这个关于行向量组同时也是标准正交组，这个结论直接由$QQ^T=I$推出。乘积QQ^T要对Q的每一行与其它任何一行作内积，而

* 大概标准正交矩阵可能是一个更好的名字，但是这样一个改变已为时太晚了。

且由于其积是单位矩阵，从而这些行向量是标准正交的。我们必须看到这个结论是多么值得注意。行向量有与列向量完全不同的指向，但当列向量互相垂直时，行向量也互相垂直！

例 1

$$Q=\begin{bmatrix}\cos\theta & -\sin\theta\\ \sin\theta & \cos\theta\end{bmatrix} \qquad Q^T=Q^{-1}=\begin{bmatrix}\cos\theta & \sin\theta\\ -\sin\theta & \cos\theta\end{bmatrix}$$

Q把每个向量旋转θ角，而Q^T则把它旋转回来$-\theta$角。

例 2　任何置换P都是一个正交矩阵，因为它的列向量恰是单位向量而且两两正交的——1在每一列中出现在不同位置上：

如果 $P=\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}$，　　则 $P^{-1}=P^T=\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}$

如果 $P=\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\\ 1 & 0 & 0\end{pmatrix}$　则$P^{-1}=P^T=\begin{pmatrix}0 & 0 & 1\\ 1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix}$

在前一情形中，单位矩阵仅有两行交换位置，它有特殊的性质$P^{-1}=P$。但这不是一般情况，也不同于第二个例子的情况，在第二个例子中三行均移动了。也应注意到：$P=\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}$不是例 1 中的旋转$Q$之一；$Q$值不产生$P$。而$P$把每个点$(x, y)$反射到它的关于45°斜线$y=x$的镜面像$(y, x)$上。所以我们以前猜想每一个正交矩阵$Q$都是一个纯粹的旋转是不对的。

还有一个性质，它是旋转矩阵Q和置换矩阵P所共有的，而且事实上也是每个正交矩阵所共有的。它是所有性质中最重要，最具特征的一个性质：

3N　用一个正交矩阵Q去乘一个向量将保持其长度不变：

$$\|Qx\|=\|x\| \qquad 对每个向量x \tag{37}$$

而且它也保持内积不变：

$$(Qx)^T(Qy)=x^Ty \qquad 对所有向量x和y \tag{38}$$

证明是直接的，因为$(Qx)^T(Qy)=x^TQ^TQy=x^TIy=x^Ty$。如果$y=$

x，这个等式变成 $\|Qx\|^2=\|x\|^2$，从而当内积不变时长度也不变。

例　对于前面描述过的"平面旋转"，

$$\begin{bmatrix}\cos\theta & -\sin\theta\\ \sin\theta & \cos\theta\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\ y\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x\cos\theta-y\sin\theta\\ x\sin\theta+y\cos\theta\end{bmatrix}$$

向量长度保持不变，因为

$$(x\cos\theta-y\sin\theta)^2+(x\sin\theta+y\cos\theta)^2=x^2+y^2$$

练习3.3.4　若 Q_1，Q_2 都是正交矩阵，从而都满足(36)，证明 Q_1Q_2 也是正交矩阵。

练习3.3.5　若 u 是一个单位向量，证明 $Q=I-2uu^T$ 是一个正交矩阵（它就是所谓Householder变换）。当 $u=(1,1,1)/\sqrt{3}$，具体算出 Q 来。

练习3.3.6　求一个位于第三列的向量，使得矩阵

$$Q=\begin{bmatrix}1/\sqrt{3} & 1/\sqrt{2} & \\ 1/\sqrt{3} & 0 & \\ 1/\sqrt{3} & -1/\sqrt{2} & \end{bmatrix}$$

成为正交矩阵。这个向量必是一个单位向量而且与其它两个列向量正交。这个列向量的选取有多大的自由度？验证 Q 的行向量同时自动成为标准正交的。

练习3.3.7　通过直接计算 v^Tv 来验证：对于标准正交向量组的任何组合 $v=x_1q_1+\cdots+x_nq_n$，勾股定理均成立：

$$\|v\|^2=x_1^2+\cdots+x_n^2$$

用矩阵的形式来写，就是 $v=Qx$，因此这就给出长度保持不变：$\|Qx\|^2=\|x\|^2$ 这个事实的一个新的且更清楚的证明。

练习3.3.8　下列矩阵是正交的吗？

$$Q=\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

Gram Schmidt正交化过程

我们已强调指出了标准正交向量组所带来的特别方便之处：为求Q的逆，我们只需要把它转置一下。而解最小二乘问题$Ax=b$，我们只需要给出$\overline{x}=A^Tb$。不过每次我们在开始时都需要强调说："如果列向量组是标准正交的……"。现在我们的目的就是要找到一个把列向量组标准正交化的方法。

这是一种手续，它可以在解课题本身之前先施行。为了解释它，我们举一个最简单的例子。我们给定两个无关的向量a和b，我们希望造出两个相互垂直的向量v_1和v_2。这第一个可以取a，$v_1=a$。于是问题成为求与它垂直的第二个向量。但这恰好用到本章一开始时所给出的方法：向量$b-p$是与a垂直的，因为b的沿a方向的分量(即：p)已被减去了。这第二个轴将落在这个方向上：

$$v_2=b-p=b-\frac{a^Tb}{a^Ta}a=b-\frac{v_1^Tb}{v_1^Tv_1}v_1 \tag{39}$$

立即可以验证　$v_1^Tv_2=v_1^Tb-v_1^Tb=0$。

为给出Gram-Schmidt正交化方法，现在假定有第三个线性无关的向量c。下一步的想法是完全一样的。我们减去c在v_1和v_2两个方向上的分量，而这些分量我们已经求出来了；

$$v_3=c-\frac{v_1^Tc}{v_1^Tv_1}v_1-\frac{v_2^Tc}{v_2^Tv_2}v_2 \tag{40}$$

v_3自然与v_1和v_2是垂直的；例如。

$$v_1^Tv_3=v_1^Tc-\frac{v_1^Tc}{v_1^Tv_1}v_1^Tv_1-\frac{v_2^Tc}{v_2^Tv_2}\overset{0}{\nearrow}{v_1^Tv_2}=0$$

实际上我们是由 c 中减去它在a、b张成的平面上的分量，但是使用此平面上已建立起来的相互垂直的方向v_1和v_2就容易得多了，因为c在这个平面上的射影就是它在轴v_1和v_2上射影的和，从而使(40)式变成如此简单了。注意，v_3不可能是零向量，否则 c 将位于 a，b张成的平面之中，这与 a，b 和 c 线性无关相矛盾。当然，向量v_i只是正交的而不是标准正交的。为了把它们化为单位向量，我们将对每一个除以其长度：

$$q_1=\frac{v_1}{\|v_1\|},\qquad q_2=\frac{v_2}{\|v_2\|},\qquad q_3=\frac{v_3}{\|v_3\|}$$

这种用减去v_1，…，v_{i-1}适当倍数来造出新的v_i的正交化方法可以综述如下：

3O 任何一个无关的向量组$a_1,\cdots,a_n$都可以用Gram-Schmidt正交化过程转化为一个正交向量组：首先，$v_1=a_1$，然后，使每个v_i与前面的v_1，…，v_{i-1}均正交：

$$v_i=a_i-\frac{v_1^Ta_i}{v_1^Tv_1}v_1-\cdots-\frac{v_{i-1}^Ta_i}{v_{i-1}^Tv_{i-1}}v_{i-1} \tag{41}$$

对每个 i 来说，由原来的a_1，…，a_i张成的子空间也由$v_1,\cdots,v_i$所张成，而最终的向量组$q_i=v_i/\|v_i\|$（$i=1,\cdots,n$）是标准正交的。

例 假设给定的向量组是

$$a_1=\begin{bmatrix}1\\1\\0\end{bmatrix},\qquad a_2=\begin{bmatrix}1\\0\\1\end{bmatrix},\quad a_3=\begin{bmatrix}0\\1\\1\end{bmatrix}$$

取$v_1=a_1$，v_2按(39)式算出：

$$\frac{a_2{}^T v_1}{v_1{}^T v_1}=\frac{1}{2}$$

$$v_2=a_2-\frac{1}{2}v_1=\begin{pmatrix}\frac{1}{2}\\ -\frac{1}{2}\\ 1\end{pmatrix}$$

而第三个垂直轴由方程(40)给出：

$$\frac{a_3{}^T v_1}{v_1{}^T v_1}=\frac{1}{2},\qquad \frac{a_3{}^T v_2}{v_2{}^T v_2}=\frac{\frac{1}{2}}{\frac{6}{4}}=\frac{1}{3},$$

$$v_3=a_3-\frac{1}{2}v_1-\frac{1}{3}v_2=\begin{pmatrix}-\frac{2}{3}\\ \frac{2}{3}\\ \frac{2}{3}\end{pmatrix}。$$

最終的标准正交向量组为

$$q_1=\frac{v_1}{\|v_1\|}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ 1\\ 0\end{pmatrix},\qquad q_2=\frac{v_2}{\|v_2\|}=\sqrt{\frac{2}{3}}\begin{pmatrix}\frac{1}{2}\\ -\frac{1}{2}\\ 1\end{pmatrix},$$

$$r_3=\frac{v_3}{\|v_3\|}=\sqrt{\frac{3}{4}}\begin{pmatrix}-\frac{2}{3}\\ \frac{2}{3}\\ \frac{2}{3}\end{pmatrix}。$$

Gram-Schmidt 算法简单而又直接，因此它应该有一个直接写出其结果的相当简单的方法。我们想说明一个怎样能做到这一点。情况正好可与高斯消去法相比较，在那里初等变换是以一种自然的方式来选定，但是要想事先列出整个的序列则是非常麻烦的。因此，把结果用简单的形式记录下来的正确方法是给出分解式 $A=L\cdot U$。而在目前情形中，Gram-Schmidt正交化过程将用矩阵 A 的另一种分解式记录下来。

如同消去法的情形一样，关键在于弄清楚原来的向量 a_i 怎样由最终得出的向量 q_i 还原出来？让我们来研究一下刚才的例子，不难算出

$$a_1=v_1 \qquad\qquad a_1=\sqrt{2}\,q_1$$

$$a_2=\frac{1}{2}v_1+v_2 \qquad \text{或者} \qquad a_2=\sqrt{\frac{1}{2}}\,q_1+\sqrt{\frac{3}{2}}\,q_2$$

$$a_3=\frac{1}{2}v_1+\frac{1}{3}v_2+v_3 \qquad a_3=\sqrt{\frac{1}{2}}\,q_1+\sqrt{\frac{1}{9}}\,q_2+\sqrt{\frac{4}{3}}\,q_3$$

这个方程组也可用矩阵记号写为：

$$(a_1\ \ a_2\ \ a_3)=(q_1\ \ q_2\ \ q_3)\begin{bmatrix}\sqrt{2} & \sqrt{\frac{1}{2}} & \sqrt{\frac{1}{2}}\\ 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} & \sqrt{\frac{1}{6}}\\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{4}{3}}\end{bmatrix} \tag{42}$$

原来的矩阵A被分解成一个正交矩阵Q和一个上三角矩阵R的乘积。

Q 的列向量组是我们所要求的标准正交向量组，而 R 的元素（几乎)可以从方程(41)中直接看出，这个方程把 a_i 表示成 v_1，…，v_i 的组合，从而我们只要用 $\|v_1\|q_1$ 代替 v_1，用 $\|v_2\|q_2$ 代替 v_2，…就行了。于是 v_i 是 q_1，…，q_i 的线性组合而不涉及 q_{i+1}，…，q_n，这就是 R 是上三角矩阵的道理。这个组合的系数组成 R 的第 i 列，而且

其中对角线元素不为零，这是因为在(41)式中用$\|v_i\|q_i$代替v_i，所以对角线元素是非零系数$\|v_i\|$*。R的对角线元素都是正的，因而是可逆的。这就得出了本节的主要结果：

3P **任何具有线性无关列向量组的矩阵A可分解为乘积$A=QR$：Q的列向量组是标准正交的，而R是一个可逆的上三角矩阵。如果原来的矩阵是方阵，则这两个因子Q和R也是方的，而且Q成为一个正交矩阵。**

由$A=QR$出发，解最小二乘问题$Ax=b$就变得很容易了。由(21)式，我们知道

$$\overline{x}=(A^TA)^{-1}A^Tb=(R^TQ^TQR)^{-1}R^TQ^Tb$$

但是Q的列向量组是标准正交的，所以$Q^TQ=I$。于是

$$\overline{x}=(R^TR)^{-1}R^TQ^Tb=R^{-1}Q^Tb \tag{43}$$

因此为求$\overline{x}$，只需要计算矩阵与向量的乘积Q^Tb，以及对三角形方程组 $R\overline{x}=Q^Tb$进行倒转代换。预先的正交化工作使我们摆脱了计算A^TA和解正规方程$A^TAx=A^Tb$的任务**。

练习3.3.9 应用Gram-Schmidt正交化过程于

$$a_1=\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix},\quad a_2=\begin{bmatrix}0\\1\\1\end{bmatrix},\quad a_3=\begin{bmatrix}1\\1\\1\end{bmatrix}$$

并把结果写成$A=QR$的形式。

练习3.3.10 把$A=\begin{bmatrix}3&0\\4&5\end{bmatrix}$分解成$QR$。

练习3.3.11 把

$$a_1=\begin{bmatrix}1\\2\\2\end{bmatrix},\quad a_2=\begin{bmatrix}1\\3\\1\end{bmatrix}$$

的Gram-Schmidt正交化过程表为$A=QR$的形式。给定n个具有m

---

* 这些长度$\|v_i\|$出现在(42)式的对角线上。

** 真正解脱不在于计算量（事实上，共把预先的工作包含去内，计算量更大了），而在于数值的稳定性，至少当我们转为使用在练习3.3.14中给出的修改了的Gram-Schmidt算法，或§7.3给出的（更好的）Householder算法时是如此。

个分量的向量a_i，A，Q和R的形状各是什么样？

练习3.3.12 对上题的A及$b=(1, 1, 1)^T$，使用$A=QR$来解最小二乘问题$Ax=b$。

练习3.3.13 若$A=QR$，求出A的列向量空间的射影矩阵P的的简单公式。

练习3.3.14 证明下述两个步骤

$$w = c - \frac{v_1^T c}{v_1^T v_1} v_1 \qquad v_3 = w - \frac{v_2^T w}{v_2^T v_2} v_2$$

得出与公式(40)相同的第三个方向v_3。这是一个修改了的Gram-Schmidt正交化过程的例子，在这个过程中为保证数值稳定，一次只减去一个射影。

函数空间和Fourier级数

这是一个简要的选读章节，但是它有若干良好的意向：

(1)首次介绍一个无限维向量空间；

(2)把长度和内积的想法由向量v扩充到函数$f(x)$；

(3)把f的Fourier级数理解为一维射影的和；张成此一维空间的正交“列向量”是正弦和余弦函数。

(4)把Gram-Schmidt正交化过程用于多项式1、x，x^2，…。

(5)找出$f(x)$的最佳直线逼近。

我们将按上述梗概有系统地叙述，这将开辟线性代数应用的新领域。

1 在研究了所有有限维空间R^n之后，很自然地想到R^∞——它包含着所有的向量$v=(v_1, v_2, v_3, \cdots)$，这个向量有无穷多个分量。如果对分量$v_j$没有任何限制，这个空间实际上过大，从而失去它的价值。一个较好的想法是保留长度的熟知的定义（分量平方和的平方根），而且只包含那些有有限长度的向量：无穷级数

$$\|v\|^2 = v_1^2 + v_2^2 + v_3^2 + \cdots \qquad (44)$$

必须收敛于有限和。这个向量集合仍是无限维的，例如：它包含向量$\left(1, \frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \cdots\right)$但不包含$\left(1, \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, \cdots\right)$ 具有有限长度的向量相加仍是有限长度（$\|v+w\| \leqslant \|v\|+\|w\|$），乘纯量倍也如此，所以它们构成一个向量空间，它就是著名的**希尔伯特空间**（Hilbert spaces）。

希尔伯特空间是既允许维数是无限的，而同时又保存了通常欧氏空间几何的最自然的模式。椭圆变成为无限维的椭球，抛物线变成为抛物面，而垂直则仍可按以前同样的方式去理解：向量$v=(v_1, v_2, \cdots)$和$w=(w_1, w_2, \cdots)$是正交的，如果它们的内积为零的话，

$$v^T w=v_1 w_1+v_2 w_2+\cdots\cdots=0 \tag{45}$$

这个和式保证是收敛的，而且对任何两个向量v和w，Schwarz不等式$|v^T w| \leqslant \|v\| \cdot \|w\|$仍然成立。甚至在希尔伯特空间中，余弦的绝对值也决不大于1。

关于这个空间还有另一件值得注意的事：它可以在各种各样的表面形式下被找到。它的“向量”可以是一个函数。这就引出了下述的第二点

2． 假定我们考虑一个定义在区间$0 \leqslant x \leqslant 2\pi$上的函数，例如：$f(x)=\sin x$，这个$f$如一个具有连续分量的向量，这些分量就是$\sin x$沿整个区间的值。为求出这样一个向量的长度，通常的那种把分量平方后相加起来的法则就不适用了。这样的求和自然地不可避免地要被**积分**代替：

$$\|f\|^2=\int_0^{2\pi}(f(x))^2 dx=\int_0^{2\pi}(\sin x)^2 dx=\pi \tag{46}$$

我们的希尔伯特空间成为一个函数空间，它的向量是函数。我们已有了度量它们长度的方法，而且这个空间包含所有具有有限长度的函数——就如上面(44)式那样。但它不包含函数$F(x)=1/x$，因为$1/x^2$的积分是无限的。

由积分代替求和的想法引进了两个函数的内积：如果$f(x)=\sin x$和$g(x)=\cos x$，则

$$f^T\cdot g=\int_0^{2\pi}f(x)g(x)dx=\int_0^{2\pi}\sin x\cos xdx=0$$

这个内积仍然通过$f^Tf=\|f\|^2$与长度联系起来，而且仍然满足Schwarz不等式：$|f^Tg|\leqslant\|f\|\cdot\|g\|$。当然如$\sin x$和$\cos x$这样两个函数——它们的内积为零——仍然将称为是正交的。在除以它们的长度$\sqrt{\pi}$之后它们还是正交单位向量。

3．函数$y(x)$的Fourier级数是一个关于正弦和余弦函数的展开式：

$$y(x)=a_0+a_1\cos x+b_1\sin x+a_2\cos 2x+b_2\sin 2x+\cdots$$

为计算一个典型的系数，例如：b_1，我们在其两边同乘以相应的函数$\sin x$，然后由0到2π积分。换句话说，我们取两边与$\sin x$的内积：

$$\int_0^{2\pi}y(x)\sin xdx=a_0\int_0^{2\pi}\sin xdx+a_1\int_0^{2\pi}\cos x\sin xdx$$

$$+b_1\int_0^{2\pi}(\sin x)^2dx\cdots\cdots$$

在等式右边，除了$\sin x$乘其自身这一项外，其余的积分均为零，因为正弦函数与余弦函数是相互正交的，于是$f(x)=\sin x$的系数是

$$b_1=\frac{\int_0^{2\pi}y(x)\sin xdx}{\int_0^{2\pi}(\sin x)^2dx}=\frac{y^Tf}{f^Tf}$$

$$\text{或}\quad b_1\sin x=\frac{y^Tf}{f^Tf}f \tag{47}$$

这个计算的要点在于看出它与射影类似。向量b沿由a张成的直线方向上的分量，在本章一开始就已计算了：

$$\bar{x}=\frac{b^Ta}{a^Ta} \quad 或 \quad p=\bar{x}a=\frac{b^Ta}{a^Ta}a。$$

在一个Fourier级数中，我们把函数y射影到函数$\sin x$上，它在这个方向上的射影P恰是$b_1\sin x$这一项。系数b_1是不相容方程组$b_1\sin x=y$的最小二乘解。换句话说，它使函数$b_1\sin x$尽可能靠近函数y（见练习3.3.16）。对此级数的其它项也同样是对的，它们每一个都是y在一个正弦函数或余弦函数上的射影。因为这些正弦和余弦函数是正交的，**Fourior级数恰给出"向量"y关于一组(无限多个)相互垂直的坐标轴的坐标。**

4. 除了正弦和余弦函数之外还有很多有用的函数，而且它们不总是正交的。其中最简单的就是多项式，遗憾的是甚至不存在这样的区间，在其上前三个坐标轴（函数1，x和x^2）是垂直的。（1和x^2的内积总是正的，因为它是x^2的积分。）于是，最接近$y(x)$的抛物线也不等于它在1，x和x^2上射影之和，而一定有一个耦合项，就象在矩阵情形中的$(A^TA)^{-1}$一样。事实上这个耦合项由练习1.5.11中的病态矩阵给出。在区间$0\leqslant x\leqslant 1$上

$$A^TA=\begin{bmatrix} 1^T1 & 1^Tx & 1^Tx^2 \\ x^T1 & x^Tx & x^Tx^2 \\ (x^2)^T1 & (x^2)^Tx & (x^2)^Tx^2 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \int 1 & \int x & \int x^2 \\ \int x & \int x^2 & \int x^3 \\ \int x^2 & \int x^3 & \int x^4 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5} \end{bmatrix}$$

这个矩阵有一个很大的逆，因为轴1，x和x^2距相互垂直相差太远了。如果我们再添加更多的轴，即使使用一台现代的计算机，求逆也是不可能的。为求10次最佳逼近多项式而解正规方程$A^TA\bar{x}=A^Tb$，在实际上也是做不到的。

更确切地说，用Gauss消去法解正规方程也是没有希望的，因为每个舍入误差将被扩大10^{13}倍以上。但另一方面，我们又不肯放弃它，因为用多项式来逼近应该是可能的。所以正确的想法是转换到

正交轴上去。这意味着施行Gram-Schmidt正交化过程，即：寻求1，x和x^2的组合使之成为正交的。

取类似于$-1\leqslant x\leqslant 1$这样的对称区间来做此事是很方便的，因为这使得所有的x奇次幂与偶次幂均正交：

$$1^T x=\int_{-1}^{1} x dx=0 \qquad x^T x^2=\int_{-1}^{1} x^3 dx=0$$

于是可采用$v_1=1$和$v_2=x$作为前两个正交坐标轴，而只需调整1和x^2之间的夹角。由公式(40)，第三个正交多项式是

$$v_3=x^2-\frac{1^T x^2}{1^T 1}1-\frac{x^T x^2}{x^T x}x=x^2-\frac{\int_{-1}^{1} x^2 dx}{\int_{-1}^{1} 1 dx}=x^2-\frac{1}{3}$$

用这种方法构造出的多项式就是Legendre多项式，它们在区间$-1\leqslant x\leqslant 1$上是相互正交的。

验证

$$1^T\left(x^2-\frac{1}{3}\right)=\int_{-1}^{1}\left(x^2-\frac{1}{3}\right)dx=\left[\frac{x^3}{3}-\frac{x}{3}\right]_{-1}^{1}=0$$

现在，只需求出一个函数到前10个（或11个），Legendre 多项式上的射影，便不难算出它的10次最佳逼近多项式。

5. 设我们在区间$0\leqslant x\leqslant 1$上给定一个函数，比如$f(x)=\sqrt{x}$，我们希望用一条直线$y=C+Dx$去拟合它，那么至少有三种求最佳直线的方法。如果我们比较一下它们，那么整个这一章所述内容可能显得更清楚了1

(i)极小化

$$E^2=\int_0^1(\sqrt{x}-C-Dx)^2 dx$$

$$=\frac{1}{2}-\frac{4}{3}C-\frac{4}{5}D+C^2+CD+\frac{D^2}{3}$$

令E^2的导数为零，得出

$$\frac{\partial E^2}{\partial C}=-\frac{4}{3}+2C+D=0$$

$$\frac{\partial E^2}{\partial D}=-\frac{4}{5}+C+\frac{2D}{3}=0$$

它的解是$C=\frac{4}{15}$，$D=\frac{4}{5}$。

(ii)用最小二乘法解 $[1, x]\begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix}=[\sqrt{x}]$或$Ax=f$

$$A^TA=\begin{bmatrix} 1^T1 & 1^Tx \\ x^T1 & x^Tx \end{bmatrix}= =\begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} \end{pmatrix}$$

$$(A^TA)^{-1}=\begin{bmatrix} 4 & -6 \\ -6 & 12 \end{bmatrix}$$

$$A^Tf=\begin{bmatrix} 1^T\sqrt{x} \\ x^T\sqrt{x} \end{bmatrix}=\begin{pmatrix} \frac{2}{3} \\ \frac{2}{5} \end{pmatrix}$$

正规方程的解是

$$\overline{y}=(A^TA)^{-1}A^Tf$$

或 $$\begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 4 & -6 \\ -6 & 12 \end{bmatrix}\begin{pmatrix} \frac{2}{3} \\ \frac{2}{5} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \frac{4}{15} \\ \frac{4}{5} \end{pmatrix}$$

(iii)用 Gram-Schmidt 算法造出第二个列向量$x-\frac{1}{2}$，它自然与第一个列向量正交：

$$1^T\left(x-\frac{1}{2}\right)=\int\left(x-\frac{1}{2}\right)dx=0$$

则$\sqrt{x}$的射影是

$$y=\frac{\sqrt{x}^T 1}{1^T 1}1+\frac{\sqrt{x}^T\left(x-\frac{1}{2}\right)}{\left(x-\frac{1}{2}\right)\left(x-\frac{1}{2}\right)}\left(x-\frac{1}{2}\right)$$

$$=\frac{2}{3}+\frac{4}{5}\left(x-\frac{1}{2}\right)=\frac{4}{15}+\frac{4}{5}x$$

在我们的算法中只有方法(i)可能出现错误(现在它是正确的)，因为导数为0只是E^2极小的必要条件.

练习3.3.15 求向量$v=\left(\frac{1}{\sqrt{2}},\ \frac{1}{\sqrt{4}},\ \frac{1}{\sqrt{8}},\ \cdots\right)$的长度以及函数$f(x)=e^x$(在区间$0\leqslant x\leqslant 1$上)的长度。在这个区间内$e^x$与$e^{-x}$的内积是什么?

练习3.3.16 用令导数为0的方法求b_1的值使得下式极小化:

$$\|b_1\sin x-y\|^2=\int_0^{2\pi}(b_1\sin x-y(x))^2dx$$

请与Fourier系数(47)做一比较。若$y(x)=\cos x$，b_1等于什么?

练习3.3.17 求分段函数$y(x)$的Fourier系数a_0，a_1和b_1，$y(x)$在区间$0\leqslant x\leqslant\pi$上等于1而在区间$\pi<x\leqslant 2\pi$上等于0:

$$a_0=\frac{y^T 1}{1^T 1}\qquad\qquad a_1=\frac{y^T\cos x}{(\cos x)^T(\cos x)}$$

$$b_1=\frac{y^T\sin x}{(\sin x)^T\sin x}$$

练习3.3.18 求下一个Legendre多项式——一个与1，x和$x^2-\frac{1}{3}$正交的三次多项式

练习3.3.19 对区间$-1\leqslant x\leqslant 1$上的抛物线$y=x^2$来说，与

它最接近的直线是什么?

§3.4 广义逆矩阵和奇异值分解

一个不相容的方程组$Ax=b$的最佳解是什么？这是本章的关键问题，到目前为止，它还没有得到彻底的回答。我们现在来回答这个问题。我们的目标是找到一个对任意给定的系数矩阵A和左边的b确定$\overline{x}$的法则。

这个目标已实现了一多半，因为我们知道$A\overline{x}$应等于什么。对每个x，Ax必定在A的列向量空间中，它是这些列向量以x的分量为权的组合。于是$A\overline{x}$的最佳选择是这个列空间距给定的b最近的点P。这个选择使误差$E=\|Ax-b\|$达到极小。换句话说，最佳选择是b到列空间的射影：

$$A\overline{x}=p=Pb \tag{48}$$

在大多数的情形中——我想它包括了大多数的实际问题——这个方程足以确定$\overline{x}$本身(它是正规方程$A^TA\overline{x}=A^Tb$的另一种形式，在3I节中我们是令E达到极小时得到它的。)当然，如果p被表为A的列向量组合的方式是唯一的，$\overline{x}$就唯一确定，而这个组合的权就是$\overline{x}$的分量，这就相当于第二章的“唯一性情形”。而且我们还知道方程$A\overline{x}=p$有唯一解的几个等价条件：

(i)A的列向量组是线性无关的。

(ii)A的核仅包含零向量。

(iii)A的秩为n。

(iv)方阵A^TA是可逆的。

对于这种情形，(48)式的唯一解我们在本章中已讨论过，这就是：

$$\overline{x}=(A^TA)^{-1}A^Tb \tag{49}$$

这个相当简单的公式包括了A是可逆矩阵这种最简单的情形，这时$\overline{x}$与原来方程$Ax=b$的唯一解相同：$\overline{x}=A^{-1}(A^T)^{-1}A^Tb=A^{-1}b$。

这就启发我们来考虑描述我们目标的另一种方法：试图对一个

可以是不可逆的矩阵去定义它的广义逆矩阵(pseudoinverse) A^+*。而当矩阵A可逆时，我们希望$A^+=A^{-1}$。如果矩阵A满足上述条件(i)～(iv)，我们就可规定广义逆是(49)式中的左逆：$A^+=(A^TA)^{-1}A^T$。但是如果条件(i)～(iv)不能被满足，则$\overline{x}$不能被$A\overline{x}=p$唯一确定，从而广义逆还需要另外定义。我们必须在很多满足$A\overline{x}=p$的向量中选定一个，而且这样的选择，按其定义，将是不相容方程组$Ax=b$的最佳解$\overline{x}=A^+b$。

这个选择将按下列法则来进行：在$A\overline{x}=p$的所有解中，最佳解是具有最小长度的一个。为找到它，关键在于记住：A的行空间和核在R^n中互为正交补空间。这意味着R^n中任何一个向量均可分解为两个相互垂直的部分：它在行空间中的射影和它在核中的射影。如果我们把这个分解用于方程$A\overline{x}=p$的一个解$\overline{x}_0$，则$\overline{x}_0=\overline{x}_r+w$，其中$\overline{x}_r$在行空间中，而$w$在核中，现在有三个重要的事实：

(1)分量$\overline{x}_r$本身是$A\overline{x}=p$的一个解，因为$Aw=0$，

$$A\overline{x}_r=A(\overline{x}_r+w)=A\overline{x}_0=p.$$

(2)$A\overline{x}=p$的所有解在行空间中有相同的分量$\overline{x}_r$，只是在核中的分量w不相同。“通解是一个特解（在这里是$\overline{x}_r$）和齐次方程的一个任意解w的和”。

(3)因为这两个分量$\overline{x}_r$和w是相互垂直的，这样一个解$\overline{x}_r+w$的长度满足勾股定理：

$$\|\overline{x}_r+w\|^2=\|\overline{x}_r\|^2+\|w\|^2.$$

我们的结论是：具有最小长度的解是$\overline{x}_r$。我们应该有一个完全位于行空间中，而其在核中分量为零的解。

3Q 任何方程组$Ax=b$的最小二乘意义下的最佳解是向量$\overline{x}_r$（如果采用原来的记号，则是$\overline{x}$），它由下列两个条件确定：

---

* A^+也叫做Moore-Penrose逆矩阵，它被冠以其发现者的名字，或更一般地叫做A的推广了的逆矩阵（generalized inverse）。但是有很多其他的矩阵，它具有我们将赋予A^+的某些性质而不是全部性质，也被称为推广了的逆矩阵。因此，用广义逆矩阵这个术语更妥当一些。

（1）$A\overline{x}$等于b在A的列空间上的射影。

（2）$\overline{x}$在A的行空间之中。

“解” $Ax=b$的矩阵就是广义逆矩阵A^+，它由$\overline{x}=A^+b$来确定。

从几何的角度来解释广义逆是最好不过的了。我们再来看一看对四个基本子空间的解释（图3.7）。

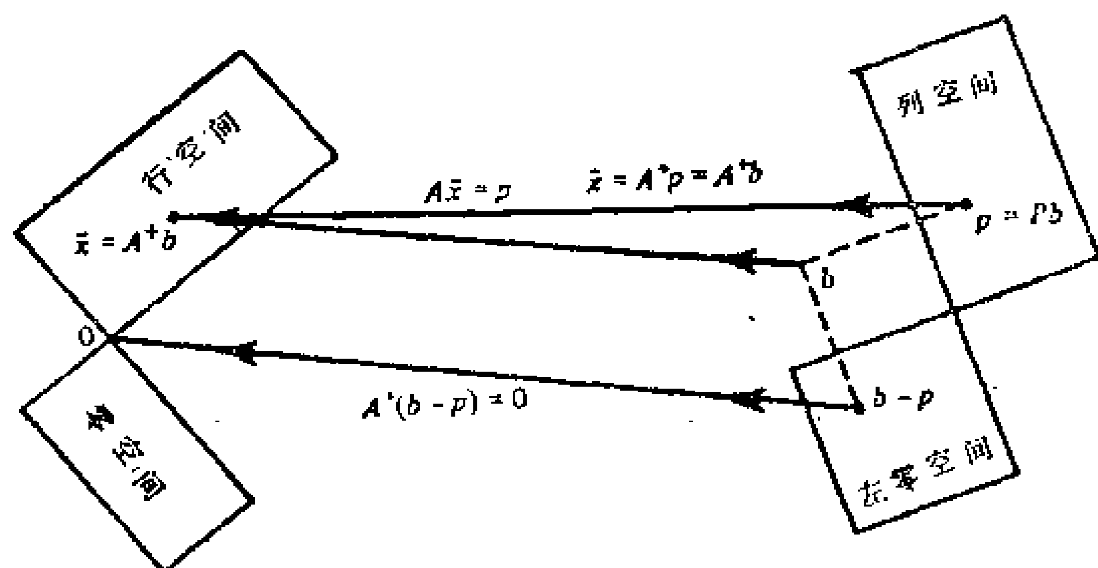


图 3.7　矩阵A和它的广义逆A^+

矩阵A^+组合了两个独立步骤的作用：把b射影到p点，然后在行空间中找出唯一的一个向量$\overline{x}$，满足$A\overline{x}=p$。一种极端的情形是当b垂直于列空间时，换句话说，b在左化零空间中，这时$p=0$，从而$\overline{x}=0$。A^+把整个$\mathcal{N}(A^T)$映为零向量。另一种极端的情形是b在列空间中，于是$p=b$，而且$\overline{x}$可由“求逆”来得到（在2Z中我们已注意到，如果我们把它理解为由A的行空间到其列空间的映射时，A是可逆的；A^+就是逆矩阵）。

任意的一个b均被分解为如下两种极端的分量：分量p用来得出$\overline{x}$，而另一个分量$b-p$被零化。由这样的描述及图3.7，我们可以列举广义逆的若干基本性质：

（1）A^+是一个$n\times m$矩阵。它由R^m中一个向量b出发，造出一个R^n中的向量$\overline{x}$。

（2）A^+的列空间是A的行空间，而A^+的行空间则是A的列空

间（作为一个重要的推论，秩A^+＝秩A）。

（3）A^+的广义逆是A。

（4）一般说来$AA^T \neq I$，因为A可以没有右逆，但是AA^+总是等于到列空间的射影P：

$$AA^+b = A\overline{x} = p = Pb \qquad 或 \qquad AA^+ = P \tag{50}$$

例 1

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

它是一个不可逆矩阵。它的行空间和列空间均为R^3中的“$x-y$平面”相同，它包含所有向量$(x, y, 0)$。核是“z-轴”。它自然与行空间正交。为找出$\overline{x}$，我们先把b射影到列空间上：

$$若 \quad b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix} \qquad 则 \qquad p = Pb = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ 0 \end{bmatrix}$$

然后我们解$A\overline{x} = p$ 或

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \overline{x}_1 \\ \overline{x}_2 \\ \overline{x}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{51}$$

它的解很容易写出来：$\overline{x_1} = b_1$ $\overline{x}_2 = b_2$ 且$\overline{x}_3$是任意的，在这无穷多个解中，我们选取一个长度最小的：它的第三个分量$\overline{x}_3$应是零。这就得出$\overline{x} = (b_1, b_2, 0)^T$，它正如上述理论所预言的那样位于行空间（$x$-$y$平面）中。最后，我们得到广义逆$A^+$：

$$A^+ = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \qquad 和 \quad A^+b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ 0 \end{bmatrix} = \overline{x}$$

对这个特殊的矩阵，A^+与A相同。这是因为A在把它的行空间映射到列空间的过程中，其作用与单位矩阵相同，而且广义逆不涉及

其余部分。

总起来说，不相容组

$$x_1+0x_2+0x_3=b_1$$
$$0x_1+x_2+0x_3=b_2$$
$$0x_1+0x_2+0x_3=b_3$$

的最佳解满足前两个方程且令$x_3=0$。

例 2

$$A=\begin{bmatrix}\mu_1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & \mu_2 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\end{bmatrix}$$

其中$\mu_1>0$，$\mu_2>0$，列空间仍然是$x-y$平面，所以对b进行射影时将把它的z分量零化为：$p=Pb=(b_1, b_2, 0)^T$，方程$A\overline{x}=p$成为

$$\begin{pmatrix}\mu_1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & \mu_2 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\overline{x}\\ \overline{x}_2\\ \overline{x}_3\\ \overline{x}_4\end{pmatrix}=\begin{bmatrix}b_1\\ b_2\\ 0\end{bmatrix}$$

前两个分量被确定为：$\overline{x_1}=b_1/\mu_1$，$\overline{x_2}=b_2/\mu_2$，而其余两个分量由于要求长度极小所以必须是零。于是最佳解是：

$$\overline{x}=\begin{pmatrix}b_1/\mu_1\\ b_2/\mu_2\\ 0\\ 0\end{pmatrix} \quad 或 \quad A^+b=\begin{pmatrix}\mu_1^{-1} & 0 & 0\\ 0 & \mu_2^{-1} & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{bmatrix}b_1\\ b_2\\ 0\end{bmatrix}$$

这两个例子是下列一类特殊矩阵的代表，它们的主对角线上前r个元素是正数μ_1，$\cdots\mu_r$而其余元素均为零。用Σ表示这个矩阵，它的广义逆可如上例那样算出来：

$$\Sigma=\begin{pmatrix}\mu_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \mu_r \\ & & & \end{pmatrix} \text{而且} \quad \Sigma^+=\begin{pmatrix}\mu_1^{-1} & & \\ & \ddots & \\ & & \mu_r^{-1} \\ & & & \end{pmatrix}$$

若Σ是$m\times n$矩阵，则Σ^+是$n\times m$矩阵，容易看出，Σ^+的秩等于Σ的秩，等于r，而且Σ^+的广义逆是Σ：$(\Sigma^+)^+=\Sigma$。

这类简单的矩阵由于矩阵A的一种新的分解方法而比它乍看起来有价值得多。这种分解叫做**奇异值分解**，它还远未被人们所熟知。

3R 任何一个$m\times n$矩阵可被分解为$A=Q_1\Sigma Q_2^T$，其中Q_1是$m\times m$正交矩阵，Q_2是一个$n\times n$正交矩阵，而Σ是上述的特殊对角矩阵。

数μ_i叫做A的奇异值。这个分解直接导出A的广义逆的一个明确的公式，一个到现在我们还缺乏的公式。在这种特殊情况下（但不是在一般情况下，见下面(60)）我们可以分别对这三个因子求"广义逆"，并按相反的顺序乘起来：因为正交矩阵的逆矩阵是它的转置阵，这个公式成为

$$A^+=Q_2\Sigma^+Q_1^T \tag{52}$$

这个公式可直接由最小二乘原理来证明。由3N可知，乘以一个正交矩阵Q_1^T不会改变向量的长度，所以被极小化的误差是

$$\|Ax-b\|=\|Q_2\Sigma Q_1^Tx-b\|=\|\Sigma Q_2^Tx-Q_1b\| \tag{53}$$

引入新的未知数$y=Q_2^Tx=Q_2^{-1}x$，它与x有相同的长度。然后我们要把$\|\Sigma y-Q_1^Tb\|$极小化，从而最佳解$\overline{y}$——所有极小化的向量中最短的一个——是$\overline{y}=\Sigma^+Q_1^Tb$。于是

$$\overline{x}=Q_2\overline{y}=Q_2\Sigma^+Q_1{}^Tb \quad \text{或} A^+=Q_2\Sigma^+Q_1{}^T \text{*} \tag{54}$$

---

* 在实际计算时，把很小的μ_i挑出来并令它等于零是必须的。否则，舍入误差和经验误差可能很容易给出一个值例如$\mu_r=10^{-6}$，从而$\mu_r^{-1}=10^6$，这将会使广义逆矩阵过大。这反映了秩及广义逆本身极端不稳定性。

奇异值分解的证明需要第五章的主要结果：对于一个如A^TA这样的对称矩阵，存在一个标准正交的"特征向量"集x_1，…，x_n（它组成Q_2的列向量组）：

$$A^TAx_i=\lambda_ix_i \quad 且x_i^Tx_i=1 \quad 和x_j{}^Tx_i=0 对j\neq i \tag{55a}$$

取与x_i的内积，我们发现$\lambda_i\geqslant 0$

$$x_i^TA^TAx_i=\lambda_ix_i^Tx_i \quad 或 \quad \|Ax_i\|^2=\lambda_i \tag{55b}$$

设λ_1，…λ_r均为正数，其余的$n-r$个Ax_i和λ_i是零。对这些正数，我们令$\mu_i=\sqrt{\lambda_i}$且令$y_i=Ax_i/\mu_i$。由(55b)，这些y_i是单位向量，而且又由(55a)它们是正交的：

$$y_j^Ty_i=\frac{x_j^TA^TAx_i}{\mu_j\mu_i}=\frac{\lambda_ix_j^Tx_i}{\mu_j\mu_i}=0 \quad 当j\neq i$$

于是我们有r个正交的单位向量，且由Gram-Schruidt正交化过程，它们可以扩充成一个完整的标准已交基$y_1,\cdots,y_r,\cdots,y_m$——它组成$Q_1$的列向量组。则$Q_1^TAQ_2$的元素是数$y_j^TAx_i$，当$i>r$时此数为零（因为$Ax_i=0$）。除这些元素以外，他们等于$y_j^T\mu_iy_i$，它当$j\neq i$时是零，当$j=i$时为$\mu_i$。换句话说，$Q_1^TAQ_2$恰是主对角线元素为$\mu_i$的特殊矩阵$\Sigma$，因此$A=Q_1\Sigma Q_2^T$。而转置矩阵$Q_1$和$Q_2$恰把$A$的列向量空间转为横排的行空间，从而使$A$变成对角矩阵$\Sigma$。

例3 如果A是一个列向量$\begin{bmatrix}3\\4\end{bmatrix}$，则$A^TA$是一个$1\times1$矩阵〔25〕，它的单位特征向量恰是$x=[1]$。这就是$Q^2$。其次，我们发现$\lambda=25$，$\mu=5$且$y^1=\frac{1}{\mu}Ax\begin{pmatrix}\frac{3}{5}\\ \frac{4}{5}\end{pmatrix}$，$Q_1$的另一列必须与$y_1$正交，所以

$$Q_1{}^TAQ_2=\begin{pmatrix}\frac{3}{5} & \frac{4}{5}\\ \frac{4}{5} & -\frac{3}{5}\end{pmatrix}\begin{bmatrix}3\\4\end{bmatrix}[1]=\begin{bmatrix}5\\0\end{bmatrix}=\Sigma$$

它具有我们所希望的特殊对角形状。列向量Σ的广义逆是行向量$\Sigma^+=\left[\frac{1}{5},\ 0\right]$，故最后得知，$A^+=Q_2\Sigma^+Q_1^T=\left[\frac{3}{25},\ \frac{4}{25}\right]$，注意$A^+A=I$；这是一个秩$r=n$（$=1$）的例子，所以广义逆是一个特别的左逆阵。

当然，奇异值分解要求我们找到正交矩阵Q_1和Q_2，而通过初等行变换一般是不可能做到这一点的。因此，试图由高斯因子L和U去计算$\overline{x}$更接近于开头几章的思路。其结果很像A^{-1}的分解$U^{-1}L^{-1}$。我们将给一个完整的证明（因为在其它地方找不到它）——当然允许省略*！

关键在于丢掉U的零行这种想法，这种想法在102页中已介绍过了。如果A的秩为r，那么将有$m-r$个这样的零行。与此同时，我们也要丢掉L的后（$m-r$）个列（如果在消去过程中某些行需要交换的话，就去掉$P^{-1}L$的这些列）。$\overline{U}$就是由U的剩下的p行组成的$r\times n$矩阵，而$\overline{L}$则是由L的剩下的r列组成的$m\times r$矩阵。

例 4 （秩$r=2$）

$$A=\begin{bmatrix}1&2\\2&5\\3&7\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1&0&0\\2&1&0\\3&1&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&2\\0&1\\0&0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1&0\\2&1\\3&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&2\\0&1\end{bmatrix}=\overline{L}\,\overline{U}$$

L的最后一列——它仅仅乘以U的最后一行——被去掉而不改变乘积：$LU=\overline{L}\,\overline{U}$。重要的事实是：

（1）$\overline{U}$是一个秩r的$r\times n$矩阵；它与U有相同的行空间，因为只是零行被去掉了，而且与A也有相同的行空间。

（2）$\overline{L}$是一个秩也为r的$m\times r$矩阵；L是可逆的（所以P也可逆），因此它的前r列必定是无关的。正如我们在§2.6中所注意到的，$\overline{L}$与A有相同的列空间。

籍助于分解式$A=\overline{L}\,\overline{U}$，我们可以用一种完全清楚的方式最终

* 我们并没有说这个新的更“直接”的公式(56)在数值计算上比(52)式或Gram-Schmidt算法更好，大概情况恰恰相反。

构造出A^+来：

3S　任何$m\times n$矩阵的广义逆矩阵是

$$A^+=\overline{U}^T(\overline{U}\,\overline{U}^T)^{-1}(\overline{L}^T\overline{L})^{-1}\ \overline{L}^T \tag{56}$$

为了证明公式(56)的正确性，我们必须验证A^+b是最小二乘问题$Ax=b$的最佳解。正如前面所说的，$\overline{x}$是由两个要求所确定的——它位于A的行空间之中，而且$A\overline{x}$等于b在列空间中的射影——，因此证明的关键在于把这些要求与上面列举的关于$\overline{U}$和$\overline{L}$的两个性质相配合。

(1′)当我们按(56)式计算A^+b时，它将是$\overline{U}^T$(在公式的左端)和某个复杂的向量y的乘积。换句话说，它将是$\overline{U}^T$的列向量的一个组合。而$\overline{U}^T$的列向量就是$\overline{U}$的行向量，所以A^+b一定在$\overline{U}$的行空间之中，而它也是A的行空间。这样，第一个要求就满足了。

(2′)用A来乘A^+b，我们希望得到p：

$$\begin{aligned}AA^+b&=(\overline{L}\,\overline{U})(\overline{U}^T(\overline{U}\,\overline{U}^T)^{-1}(\overline{L}^T\overline{L})^{-T}\ \overline{L}^Tb)\\&=\overline{L}(\overline{L}^T\overline{L})^{-1}\ \overline{L}^Tb\end{aligned} \tag{57}$$

但是$\overline{L}(\overline{L}^T\overline{L})^{-1}\overline{L}^T$恰是到$\overline{L}$的列空间上的射影，这个列空间也是$A$的列空间，所以(57)就是向量$p=Pb$。向量$A^+b$满足最佳解的两个要求，从而(56)式是正确的。

练习3.4.1　求$m\times n$的零矩阵$A=0$的广义逆，并解释你的理由。

练习3.4.2　对一个秩为1的矩阵，分解式$A=\overline{L}\,\overline{U}$与$A=uv^T$是一致的，两者都是一个列向量和一个行向量的乘积。对于

$$A=\begin{bmatrix}1&1&1\\1&1&1\end{bmatrix}\qquad \text{和 } b=\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}$$

求A^+和$\overline{x}$。把b射影到列空间上去，并验证$A\overline{x}=p$。

练习3.4.3　若A有正交的单位列向量组，那么它的广义逆是什么？

练习3.4.4　若AA^T可逆，则$A^+=A^T(AA^T)^{-1}$，且$\overline{x}=A^+b$。

(a)验证$A\overline{x}=b$

(b)对$A=[1\ \ 1]$ 求$u+v=3$的最佳解。

练习3.4.5 Penrose当初是用完全不同的方式来定义A^+的。他证明了对任何的A存在且仅存在一个矩阵A^+满足下列四个条件：

(i)$AA^+A=A$　　　　(ii)$A^+AA^+=A^+$

(iii)$(AA^+)^T=AA^+$　　　　(iv)$(A^+A)^T=A^+A$

我们则（对同一个A^+）采用一个更几何，更直观的定义。但它的代数的定义使得验证所得的矩阵满足广义逆要求变得简单了。

(a)证明：若A是一个射影矩阵（$A^2=A$且$A=A^T$），则取$A^+=A$就满足(i)～(iv)。于是它的广义逆就是A本身。见例1和练习3.4.1。

(b)证明：$(A^+)^T$满足A^T的广义逆的要求，所以$(A^T)^+=(A^+)^T$（推论：若A对称，则A^+也是对称的。）

(c)证明：就如我们早先对Σ所验证的及对每个A所阐述的那样，A^+的广义逆就是A。

§3.5 加权最小二乘问题

我们暂先回到最简单的最小二乘问题，用两次观测量$x=b_1$和$x=b_2$来估算一个病人的体重。除非这两个观测量是相同的，否则我们将面对着一个由两个方程组成的一元不相容方程组：

$$\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}[x]=\begin{bmatrix}b_1\\b_2\end{bmatrix}$$

到目前为止，我们一直把两次观测值视为同等可靠的，并去寻求使得$E^2=(x-b_1)^2+(x-b^2)^2$达到极小的值$\overline{x}$：

$$在\quad \overline{x}=\frac{b_1+b_2}{2}处\qquad \frac{dE^2}{dx}=0$$

这个最佳的$\overline{x}$是观测值的平均值。

现在假设**这两次观测值不能同等看待**。值$x=b_1$可能是从比$x=b_2$更精确的刻度得到的，或者在统计上来源于一个大样本。虽

然如此，但如果有某些信息包含在第二个观测值中，我们就不能完全相信 $x=b_1$。一个最简单的折衷方案是在两个观测值上附以不同的权 w_i^2，并选取 $\overline{x}$ 使得**加权平方和**：

$$E^2=w_1^2(x-b_1)^2+w_2^2(x-b_2)^2 \tag{58}$$

达到极小。若 $w_1>w_2$，则较多的份量附在第一个观测值上，而且极小化过程中使 $(x-b_1)^2$ 变小就更困难一些。我们容易算出：

$$\frac{dE^2}{dx}=2\left[w_1^2(x-b_1)+w_2^2(x-b_2)\right]$$

并令等于零而得出新的值 $\overline{x}_w$：

$$\overline{x}_w=\frac{w_1^2b_1+w_2^2b_2}{w_1^2+w_2^2} \tag{59}$$

当 $w_1=w_2=1$ 代入上式，得出 b_1 和 b_2 的平均值，$\overline{x}_w$ 是数据的加权平均值。这个平均值距 b_1 比距 b_2 更近一些。

有两种方法来讨论加权最小二乘问题。一个是算出由(58)中 E^2 所引出的通常最小二乘问题。它有如下方程

$$\begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \end{bmatrix}[x]=\begin{bmatrix} w_1 & b_1 \\ w_2 & b_2 \end{bmatrix} \text{且} \quad E^2=(w_1x_1-w_1b_1)^2+(w_2x-w_2b_2)^2$$

这恰与原来问题的加权 E^2 是相同的。用这种方法来讨论，加权把原来的方程组 $Ax=b$ 变成一个新的方程组 $WAx=Wb$，其中

$$A=\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \qquad \text{且} W=\begin{bmatrix} w_1 & 0 \\ 0 & w_2 \end{bmatrix}$$

加权的 $\overline{x}_w$ 是 $WAx=Wb$ 的通常最小二乘解。

这种讨论问题的方法有一个明显但又重要的推论：如果方程组被变成 $WAx=Wb$，那么我们必须期望最小二乘解也改变。我们强调指出：若 A 是可逆的，这样一个改变就就不可能发生：在前一情形中，$x=A^{-1}b$，而在后一情形中，$x=(WA)^{-1}Wb=A^{-1}W^{-1}Wb=A^{-}b$。这些精确解是相同的，反过来，在最小二乘问题中 $\overline{x}=A^{+}b$ 和 $\overline{x}_w$

$\overline{x}_w=(WA)^+Wb$是不相同的。这并没有什么奇怪的，但它告诉我们一个令人不快的结论：

3T 乘积的逆的法则，$(BA)^{-1}=A^{-1}B^{-1}$，对广义逆来说不成立：一般说来

$$(WA)^+\neq A^+W^+ \tag{60}$$

证：如果这个法则对比特定的矩阵W（它是可逆的，所以它的逆与广义逆是相同的）有效，于是加权的$\overline{x}_w$应是

$$\overline{x}_w=(WA)^+Wb=A^+W^{-1}Wb=A^+b=\overline{x}$$

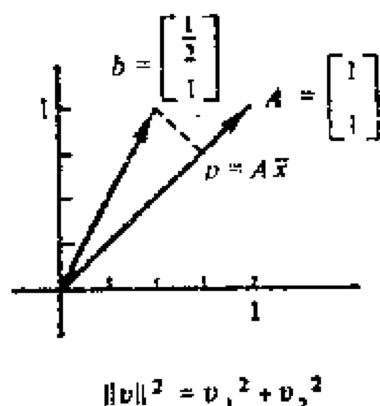
但是$\overline{x}_w$与$\overline{x}$不相等，所以此法则不成立。

刚才我们已讲了有两种讨论加权最小二乘问题的方法。另一种方法是否把$Ax=b$变为$WAx=Wb$，而且改变长度的定义，保留原来的方程。在加权问题中的自然长度是平方的加权和：

$$\text{向量 } v=\begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} \text{有长度 } \|v\|_w=(w_1^2v_1^2+w_2^2v_2^2)^{\frac{1}{2}} \tag{61}$$

利用这种改变，我们通常令误差$E=\|Ax-b\|_w$达到极小。因为E^2恰是平方加权和，它的极小值将在$\overline{x}_w$处出现。用长度的新定义，距b的最近点将由$A\overline{x}$移到$A\overline{x}_w$，用改变了的坐标轴可以最好地解释这一点（图3.8）。把

$$\overline{x}=\frac{b_1+b_2}{2}=\frac{3}{4}$$



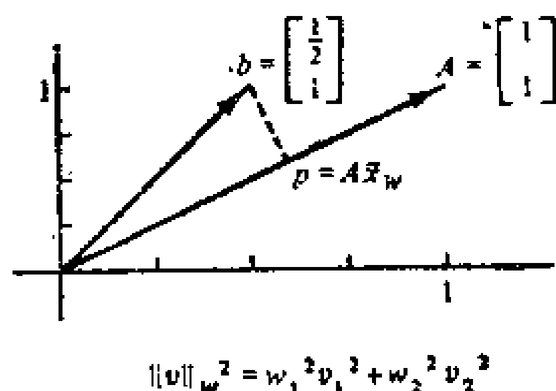


图 3.8 长度的改变和$\overline{x}$的变化

改变为 $\overline{x}_w = \frac{w_1{}^2 b_1 + w_2{}^2 b_2}{w_1{}^2 + w_2{}^2} < \frac{3}{4}$

射影将向下移动。

因为加权平均值小于$\frac{3}{4}$，它距第一个测量值$b_1=\frac{1}{2}$比距测量值$b^2=1$更近。通过把一个坐标轴比另一个拉长了，我们就赋予它更多的价值。

权，长度和内积

在下面几段里，我们要说明上面例子在所有的加权最小二乘问题中是非常典型的。同时，我们将找到两个向量所有可能的内积和所有相应的长度定义。幸运的是，这个非常重大的推广是很容易完成的。

我们开始讨论一个最小二乘问题$Ax=b$。若m个测量值不能同等看待，于是不同的权w_1，…，w_m被附在m个方程中。这就推广了我们原来的例子，但还有其他的更精细的推广。除了它们不相同的可信度外，这些观测可以是不独立的。在这种情形中，我们也引入一个系数w_{ij}它是衡量测量值i与测量值j的联结程度。于是

$$Ax=b \quad 变为 \quad WAx=Wb \tag{62}$$

数w_1，…，w_n位于W的主对角线上，联结系数如果有的话则是非对角线元素。

注：在统计中，这大致相应于引入回归系数，或法化之后引入相关系数，我们的加权矩阵W和统计中的协方阵V之间的确切关系在这一章的最后一段给出。

为解这个新的问题$WAx=Wb$，我们只需要回过头来考虑原始问题的正规方程$A^TAx=A^Tb$，并作适当的改变——A被WA代替，而b被Wb代替。

3U 若A有无关的列向量组（它的秩为n）且W是可逆的，则$WAx=Wb$的最小二乘解可由加权正规方程：

$$(A^TW^TWA)\overline{x}_w=A^TW^TWb \tag{63}$$

所确定。若我们记W^TW为H^*，则$\overline{x}_w=(A^THA)^{-1}A^THb$。

这就给出了解加权最小二乘问题的第一种方法，现在我们转向第二种方法。读者还记得，在开始的2×1矩阵的例子中，关键的想法是改变长度的定义，于是我们要对更一般的加权矩阵恰当地做同一件事。

3V 若W是一个可逆矩阵，可以按下列法则定义一个新的长度和内积：x的新长度等于Wx的旧长度，而x和y的新内积等于Wx和Wy的旧内积：

$$\|x\|_w=\|Wx\|$$

且 $$(x,\ y)_w=(Wx)^T(Wy)=x^TW^TWy \tag{64}$$

长度与内积按通常的法则联系起来：

$$\|x\|_w^2=(x,\ x)_w>0 \qquad \text{对所有非零向量 } x \tag{65}$$

这个定义实际上描述了所有可能的内积，换句话说，所有可能的造一个具有如下性质的函数的方法：它线性依赖于x和y，而且当$x=y\neq 0$取正值。关于W是可逆的要求是保证正定性的条件，否则在它的核中会有一个非零向量x，这个向量的长度将是$\|x\|_w=\|Wx\|=\|0\|=0$，而我们不能容许有长度为零的非零向量。

现在回过来讨论具有加权矩阵W的最小二乘问题$Ax=b$。我们可以用新的长度和内积来重新发现几何的模式。使误差$Ax=b$达到最小，即Ax的最佳选择仍是A的列空间中距b最近的点。但是当我们使$\|Ax-b\|_w=\|WAx-Wb\|$极小化时，"最近"这个词现在必须用新的长度来解释。这个点p（或更确切地说是点p_w，因为它依赖于W）仍是b在列空间的射影，而且误差向量$b-p_w$与此空间垂直。但是还有些变化：现在，垂直意味着新内积为零，于是点$p_w=A\overline{x}_w$由下列性质确定：$b-p_w$与列空间中每一个向量Ay垂直：

$$(Ay)^Tw^Tw(b-A\overline{x}_w)=0 \qquad \text{对所有的 } y\text{。}$$

从而，与y^T相乘的向量必定为零：

$$A^TW^TW(b-A\overline{x}_w)=0$$

* 矩阵$H=W^TW$（W可逆）就是第六章所说的正定矩阵。

或 $$A^TW^TWA\overline{x}_w = A^TW^TWb;$$
这样一来，我们便重新得出加权正规方程（63）。

我们将怀着几分悲观的情绪来试图画一个图（图3.9），它解释了这一类新的垂直性。或者如图3.8那样，这个空间相对于W可以拉长，或者可以保留通常的轴而改变角度，使之看起来不象直角。

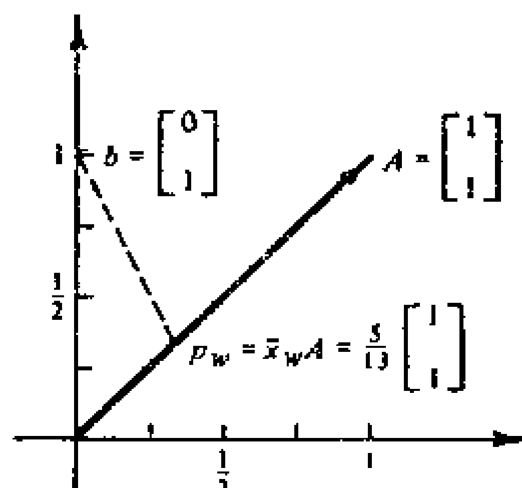


图 3.9 加权最小二乘法和W一垂直性

按此图进行的计算如下：给定

$$WAx=Wb \qquad 或 \begin{bmatrix}2&1\\1&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}(x)=\begin{bmatrix}2&1\\1&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}$$

加权正规方程是

$$(WA)^TWA\ \overline{x}_w=(WA)^TWb$$

或 $$(3\quad 2)\begin{bmatrix}3\\2\end{bmatrix}\overline{x}_W=(3\ \ 2)\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}$$

或 $$\overline{x}_w=\frac{6}{13}.$$

作为关于最小二乘问题的最后一个注记，我们希望把我们所用方法与统计应用中惯用的下列方法联系起来：m个方程$Ax=b$的误差假设有平均值零，而且有协方差矩阵V，则最佳估计$\overline{x}$是正规方程$A^TV^{-1}A\overline{x}=A^TV^{-1}b$的解。而这些方程只要令$H=W^TW$取为V

的逆就与(63)相同。

练习3.5.1 令$W=\begin{bmatrix}2&0\\0&1\end{bmatrix}$求$\overline{x}_w$。它给$x=1$的权是给$x=4$的权的两倍：$W_1=2$且$W_2=1$。

练习3.5.2 对同上的W，什么向量与$b=\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}$是$W$-垂直的？$b$本身的加权长度$\|b\|_w$是什么？

练习3.5.3 对$w=\begin{bmatrix}2&1\\1&2\end{bmatrix}$测量值$x=1$和$x=0$的最佳平均值$\overline{x}_w$是多少？

练习3.5.4 什么样的矩阵W造出的新长度和新内积与原有的相同？

复 习 题

3.1 怎样用因子矩阵A^T，B^T，和C^T来表示$(ABC)^T$？

3.2 用uv^T的形式表示秩一矩阵

$$A=\begin{bmatrix}2&3\\6&9\end{bmatrix}$$

并采用同一形式表示A^T。

3.3 $a=(2,\ -2,\ 1)$和$b=(1,\ 2,\ 2)$之间夹角是什么？

3.4 $b=(1,\ 2,\ 2)$到$a=(2,\ -2,\ 1)$上的射影p是什么？

3.5 求向量(3,4)与(4,3)间夹角的余弦？

3.6 $b=(1,1,\ 1)$到由(1,0,0)和(1,1,0)张成的平面上的射影是什么？

3.7 方程组$u=0$，$v=2$，$u+v=4$的正规方程是什么？$\overline{u}$和$\overline{v}$是什么？

3.8 造出由(1，1，1)和(0，1，3)张成的子空间中的射影矩阵P。

3.9 哪一条直线给出下列数据的最佳拟合：$x=0$时$y=0$和$x=3$时$y=12$？

3.10 哪一条直线$y=Dt$是下列两点的最佳拟合：$t=1$时$y=1$和$t=2$时

$y=1$?

3.11　什么样的常值函数在最小二乘意义下在区间$0\leqslant x\leqslant 1$上最接近$y=x^4$

3.12　如果Q是正交的，那么Q^3也是吗？

3.13　找出所有这样的3×3正交矩阵：它的元素为零和1。

3.14　由$a_2=\begin{bmatrix}4\\0\end{bmatrix}$减去$a_1=\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}$的多少倍使所得结果与$a_1$正交？作一个图。

3.15　把前一练习中造出的向量单位化，从而完成Gram-Schmidt正交化过程。把

$$A=\begin{bmatrix}1&4\\1&0\end{bmatrix}$$

分解为QR。

3.16　把$\begin{bmatrix}\cos\theta&\sin\theta\\\sin\theta&0\end{bmatrix}$分解为$QR$，注意第一列已是一个单位向量。

3.17　求出$A=[3\ \ 0]$的广义逆。

3.18　对于加权矩阵

$$W=\begin{bmatrix}2&1\\1&0\end{bmatrix}$$

(0，1)与(1，0)的内积是什么

3.19　如果在一个正交矩阵中每个元素或是$\frac{1}{4}$，或是$-\frac{1}{4}$，这个矩阵是多少阶的？

第四章　行　列　式

§4.1　引　　言

行列式该怎么讲呢？这不是容易决定的事。在本世纪初的时候，行列式还被认为比产生它的矩阵要重要得多。T.Muir写了一部“行列式史”，整整的四卷。但数学的发展方向不是固定不变的，现在行列式离开线性代数的中心相当遥远。行列式是从矩阵得来的一个数，这一点是不变的。

有一种看法认为行列式为A^{-1}等提供了一种显式“公式”，一种闭封形式的紧凑而确定的表达式，这种公式并不改变我们计算A^{-1}或$A^{-1}b$的方式。甚至行列式本身也是用消去法进行计算的。事实上，可以认为消去法是把给定矩阵的元素代进我们所说公式去的最有效的方法，这一般公式的作用是告诉我们A^{-1}对矩阵A的n^2个元素是怎样的一种依赖关系，A的元素变化时A^{-1}怎样变化。

下面我列举行列式的主要应用。

（1）行列式给出了一种判别方法，判别矩阵是否可逆。A的行列式为零，则A是奇异的；$\det A\neq 0$，则A可逆。这一判别法的最重要的应用对象，是形如$A—\lambda I$的矩阵。本书中这一章主要是为讨论形如$A—\lambda I$的矩阵而写。矩阵$A—\lambda I$是从A的每一个主对角元素中都减去参数λ。问题就是求出使$A—\lambda I$为奇异的λ（特征值）。该判别法就是看矩阵的行列式是否为零。我们将看到$\det(A-\lambda I)$是λ的n次多项式。视k重根为k个根，则该多项式有n个根。也即$A-\lambda I$有n个特征根。这事实是从行列式公式得到的，不是从计算得到的。

（2）假定矩阵A的行是n维空间中平行六面体P的边的坐标*（

* 也可以假定A的列是n维空间中一平行六面体的边的坐标。但那是体积相同的另外一个平行六面体。

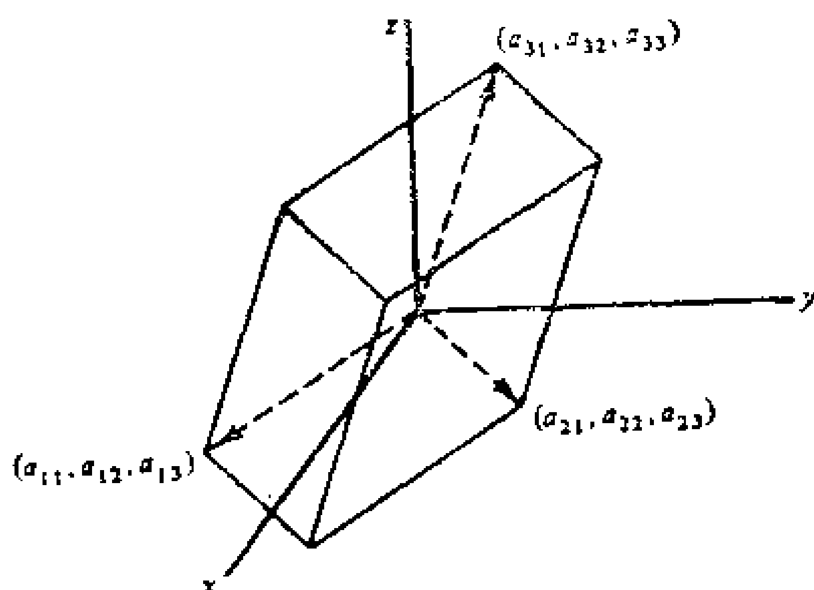


图 4.1 A的行所形成的平行六面体

图4.1），则A的行列式等于P的体积。这不大容易想象。实际上，P常常是多重积分中无穷小体积元素。最简单的体积元素是$\iiint f(x, y, z)dv$中的小立方体$dv=dxdydz$。假定为便于积分做变换$x=x'\cos y'$，$y=x\sin y'$，$z=z'$，那么类似于单变量的微分dx变为$(dx/dx')dx'$，这里体积元素$dxdydz$变为$Jdx'dy'dz'$。J相当于单变量情况下的变换因子dx/dx'，称它为雅可比（Jacobi）行列式

$$J=\begin{vmatrix} \partial x/\partial x' & \partial x/\partial y' & \partial x/\partial y' \\ \partial y/\partial x' & \partial y/\partial y' & \partial y/\partial y' \\ \partial z/\partial x' & \partial z/\partial y' & \partial z/\partial z' \end{vmatrix}=\begin{vmatrix} \cos y' & -x'\sin y' & 0 \\ \sin y' & x'\cos y' & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$$

该行列式所表示的体积为$J=x'$。它是极坐标元素$rdrd\theta$或柱坐标元素$rdrd\theta dz$中的r。这个r就是我们的小平行六面体（它的面是曲面，但棱变得越短，面就越接近于平面）。

（3）行列式给出关于主元素的一个显式公式。理论上，由它我们可以知道主元素中是否有零，因而也就知道是否需要进行交换。更重要的是，由公式

$$\det A=\pm（主元素的积）$$

我们知道，消去法不改变主元素乘积的绝对值。若干年以前人们曾

认为用行交换换走很小的主元素是徒劳的，认为换走一个还会有另一个出现。但实践中通常的情况是，不换走一个异常小的主元素，很快就会有一个异常大的主元素出现；这维持了主元素乘积的绝对值为常数，却使得得到的数值解也是无用。

（4）行列式可以用来量度$A^{-1}b$对b的每一个元素的依赖程度。实验中一个参数的改变，或一个观测数据被修正，这改正或修正对$x=A^{-1}b$的“影响系数”都是两个行列式的比。

关于行列式还有一个问题，这就是：不仅确定其重要性难，确定其在线性代数理论中的地位难，而且下定义也难。显然，$\det A$不是n^2个变量的简单函数，否则A^{-1}将比实际上容易得多。§4.3给出的显式公式需作相当多的解释。它与逆矩阵的关系远非显然。

对于行列式来说，简单的事物不是那些把它表示出来的显式公式，而是行列式自身所具有的性质。这就告诉我们应从那里开始讲。可以用（我们将用）行列式自身的三条基本性质来定义行列式。接下去就是如何系统地应用这些性质来简化公式，来计算行列式的值。这又使我们回到高斯消去法，回到主元素的乘积。更困难的理论问题是证明：不管按怎样的顺序来使用这些性质，结果都是一样的。也即说到的这些定义性质是相容的。

下一节列举行列式的性质及其最重要的推论。§4.3给出行列式的若干公式，其中一个是含有$n!$项的显式公式，另一个是归纳公式，第三个是包含主元素的公式，大矩阵的行列式实际由主元素算出。在§4.4中行列式先被用于求A^{-1}，再被用于求得解$x=A^{-1}b$。称用行列式求出解$x=A^{-1}b$的规则为克莱姆规则。最后部分讲了排列，是作为机动的。在那里我们证明了行列式定义性质的相容性，从而消除了定义中的不明确性。

§4.2 行列式的性质

性质的条数很多，幸而每条都易于理解，易于用2×2矩阵作例子解释明白。

$$\det\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}=\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix}=ad-bc$$

具有我们要讲的每一条性质，我们将逐一进行验证（矩阵A的行列式可以记为$\det A$，也可以记为$|A|$）。第四条以后的各条都是前三条的推论，我们将指出怎样由前三条推出。

1． 行列式是第一行的线性函数。也即，如果A，B，C三个矩阵第一行以外的各行都相等，A的第一行是B，C第一行的组合，则$\det A$是$\det B$和$\det C$的同样的组合。线性组合包含两点，一是数乘，一是向量加法，也即它等价于两条规则：

$$\begin{vmatrix} a+a' & b+b' \\ c & d \end{vmatrix}=(a+a')d-(b+b)'c=\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix}+\begin{vmatrix} a' & b' \\ c & d \end{vmatrix},$$

$$\begin{vmatrix} ta & tb \\ c & d \end{vmatrix}=tad-tbc=t\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix}.$$

我们强调指出，线性组合是针对一行来说的，不是针对整个矩阵，即完全不同于$\det(B+C)=\det B+\det C$，该等式不成立。

2． 两行交换，则行列式变号

$$\begin{vmatrix} c & d \\ a & b \end{vmatrix}=cb-ad=-\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix}$$

由此我们得到性质1对每一行都成立。任何一行都可以换到第一行上去，然后再换回去。从而，性质1可以改成：行列式分别是每一行的线性函数。

3． 单位矩阵的行列式是1。

$$\begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} = 1 .$$

这个条件使行列式的值正规化；性质 1 和 2 令行列式可能的取值成为一个"一维空间"，而这条性质则从中选出一个作为行列式的值.

4. A的两行相等，则$\det A=0$。

$$\begin{vmatrix} a & b \\ a & b \end{vmatrix} = ab-ba=0 .$$

这可由性质 2 推出。一方面，两行交换，行列式变号，两行相等也不例外。另方面，相等的两行交换，行列式不变。变了号，其值不变的数只有零，也即$\det A=0$。

5. 从一行减去另一行的倍数，行列式不变。

$$\begin{vmatrix} a-lc & b-ld \\ c & d \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} .$$

由性质 1 知左端等于$\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} - l \begin{vmatrix} c & b \\ c & d \end{vmatrix}$，由性质 4 知这里的第二项为零。

6. 如果有一行为零，则$\det A=0$。

$$\begin{vmatrix} 0 & 0 \\ c & d \end{vmatrix} = 0 .$$

一种证明方法是，将另外一行加到为零的行上去。由性质 5 知这不改变行列式，但新得到的行列式有两行相同，于是由性质 4 知$\det A=0$。

7. 如果A是三角矩阵，则$\det A$等于主对角线上元素的乘积$a_{11}a_{22}\cdots a_{nn}$。特别的，如果主对角线上的元素都是 1，则$\det A=1$。

$$\begin{vmatrix} a & b \\ o & d \end{vmatrix} = ad, \qquad \begin{vmatrix} a & o \\ c & d \end{vmatrix} = ad .$$

证明：假定主对角元素都不为零。那么我们可以通过基本运算消去所有的非主对角元素，将A化为

$$D=\begin{bmatrix} a_{11} & & & \\ & a_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & a_{nn} \end{bmatrix}.$$

（如果A是下三角矩阵，那么所进行的运算就是通常的消去法；如果是上三角矩阵，则改为从主对角元上面的各行中减去主对角它所在行的倍数）。由性质5知$\det D$，$\det A$相等。为求$\det D$，我们重复利用性质1，并提出所有的a_{ii}，则剩下的是一个单位矩阵，它的行列式是已知的

$$\det D=a_{11}a_{22}\cdots a_{nn}\det I=a_{11}a_{22}\cdots a_{nn}$$

三角矩阵A的任何一个主对角元素为零，则这A就是奇异的。下一条性质告诉我们，它的行列式为零。

8. 如果A是奇异的，则$\det A=0$；如果A是非奇异的，则$\det A\neq 0$。也即，当且仅当$ad-bc=0$时

$$\begin{bmatrix} a & d \\ c & d \end{bmatrix}$$

才是奇异的。如果A是奇异的，那么通过基本运算得到的是有一行全为零的U，由5和6知$\det A=\det U=0$；如果A是非奇异的，那么通过基本运算和行交换得到的上三角阵U，其主对角线元素全都不为零。这里主对角线元素就是主元素d_1，$\cdots d_n$。由性质7知$\det A=\pm\det U=\pm d^1d^2\cdots d_n$。由性质2知，正负号决定于行交换次数为偶数或奇数。

9. 对任何两个$n\times n$矩阵，积的行列式都等于行列式的积：$\det AB=(\det A)(\det B)$。

$$\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix}\begin{vmatrix} e & f \\ g & h \end{vmatrix}=\begin{vmatrix} ae+bg & af+bh \\ ce+dg & cf+dh \end{vmatrix}.$$

这相当于恒等式

$$(ad-be)(eh-fg)=(ae+bg)(cf+dh)-(af+bh)(ce+dg)$$

特别地，如果A可逆，则$\det A \det A^{-1}=\det AA^{-1}=\det I=1$，或$\det A^{-1}=1/\det A$。

前几条性质都比这一条显然。对这条性质我们给出两种证法。假定两种证法中的A和B都非奇异，A或B奇异，则AB奇异。由 8 知此时方程$\det AB=\det A\det B$，成为 0 = 0 ，性质成立。

(i)我们考虑量$d(A)=\det AB/\det B$，证明它具有性质1-3；因为这三条性质定义行列式，$d(A)$就应该等于$\det A$。例如，如果A是单位矩阵，则$d(I)=\det B/\det B=1$；这样$d(A)$就满足性质3。如果A的两行交换，则AB的相应的两行也交换，d的符号也按性质 2 改变。A的第一行的线性组合对应得出AB第一行同样的线性组合。AB的行列式除以量$\det B$所得行列式的性质 1 就对应于比$d(A)$的性质 1 。这样就得到$d(A)$等于A的行列式，从而$\det AB/\det B=\det A$。

(ii)第二个证法，先假定A为对角矩阵D，那么利用性质 1 ，提出所有的对角元素d_i，我们得到$\det DB=\det D\det B$。对于一般矩阵A我们用高斯-约当法化A为D（先用正向消去化A为U，再用反向消去化U为D）。高斯-约当法至多会因为行交换而使行列式反号，但不改变行列式的绝对值。同样的步骤也化AB为DB，对行列式的作用也一样。但对DB我们已证明了性质 9 成立。

10． 矩阵转置其行列式不变，即$\det A^T=\det A$。

$$\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix}=\begin{vmatrix} a & c \\ b & d \end{vmatrix}.$$

跟性质 9 的证明一样，先考虑奇异情况，当且只当A^T为奇异的时候A才为奇异的，此时我们有 0=0。当A非奇异，我们有$PA=LDU$，对该等式应用性质 9 ，得

$$\det P\det A=\det L\det D\det U. \qquad (1)$$

将$PA=LDU$转置，得$A^TP^T=U^TD^TL^T$对该等式应用性质 9 ，得

$$\det A^T \det P^T = \det U^T \det D^T \det L^T. \qquad (2)$$

式(1)，(2)都可以化简。L，U，L^T，U^T都是对角元素为1的三角阵。由性质7知，它们的行列式都为1。又对角矩阵等于其转置，$D=D^T$。(1)，(2)中A，A^T之外，要考虑的就只剩下排列矩阵P，P^T了。

P是经过了行交换的单位矩阵，因而它的行列式为1或-1。对任何一个排列矩阵P，我们都有$PP^T=I$（P与P^T相乘时，P第一行的1与P^T第一列的1相乘，其它各列的1都与第一行的零相乘，其它行类似）。因而$\det P \det P^T=\det I=1$。可见P与P^T的行列式必定同为1或-1。

利用上述结果我们先得到(1)，(2)右端相等，进一步就得到$\det A=\det A^T$。这一事实使得我们讲过的性质也都适用于矩阵的列，这就把性质的条数增加了一倍：矩阵两列交换，其行列式变号；矩阵两列相等（或一列为零），其行列式为零；行列式线性地依赖于它的各列。这些性质的证明，都只需先将矩阵转置，再对它的行进行证明。

行列式的性质我们就讲到这里。后面我们给出行列式的公式和公式的应用。

练习4.2.1 问$\det(2A)$，$\det(-A)$，$\det(A^2)$跟$\det A$有着怎样的关系？

练习4.2.2 试证第i行与第j行交换，可用下述方式完成，并就2×2矩阵进行验证：先把第i行加到第j行上去，再从第i行减去新的第j行，再把新的第i行加到第j行上去，最后用-1乘第i行。哪几条性质可用来产生性质2

练习4.2.3 应用行运算产生U的方法来计算

$$\det\begin{pmatrix} 1 & 2 & -2 & 0 \\ 2 & 3 & -4 & 1 \\ -1 & -2 & 0 & 2 \\ 0 & 2 & 5 & 3 \end{pmatrix} \quad 和 \quad \det\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

注 很多读者可能知道3×3行列式的计算公式。它包含6项，项数6为阶数3的两倍，见下一节的方程(5)。人们自然希望对4×4行列式也有类似的公式。公式是有的，但它包含的项数不是4的两倍8，而是4! =24。这种公式的项数太多，所以我们要介绍行运算和三角矩阵U。

练习4.2.4 称满足条件$A^T=-A$的矩阵为斜对称矩阵。

$$A=\begin{bmatrix} 0 & a & b \\ -a & o & c \\ -b & -c & o \end{bmatrix}$$

就是一个斜对称矩阵。试用比较$\det A^T$和$\det(-A)$的方法证明题给矩阵的行列式$\det A$为零，并证明2×2斜对称矩阵的行列式可以不为零，再证明奇数阶斜对称矩阵的行列式必为零。

练习4.2.5 试计算下列矩阵的行列式：

(a)乘积矩阵

$$A=\begin{bmatrix} 1 \\ 4 \\ 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 2 & -1 & 2 \end{bmatrix};$$

(b)上三角矩阵

$$U=\begin{bmatrix} 4 & 4 & 8 & 8 \\ 0 & 1 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 6 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix};$$

(c)下三角矩阵U^T；

(d)逆矩阵U^{-1}；

(e)对U施行行变换所得“倒三角矩阵”

$$M=\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 6 \\ 0 & 1 & 2 & 2 \\ 4 & 4 & 8 & 8 \end{bmatrix}.$$

练习4.2.6 利用前面的性质找出另外一种证明性质6的方法。

练习4.2.7 Q为正交矩阵，即$Q^TQ=I$。试证$\det Q$等于$+1$或-1。问Q的行（或列）构成哪一种平行六面体？

练习4.2.8 利用行运算验证4×4范得蒙行列式

$$V_4=\begin{vmatrix}1 & x_1 & x_1^2 & x_1^3\\ 1 & x_2 & x_2^2 & x_2^3\\ 1 & x_3 & x_3^2 & x_3^3\\ 1 & x_4 & x_4^2 & x_4^3\end{vmatrix}$$

$$=(x_2-x_1)(x_3-x_1)(x_4-x_1)(x_3-x_2)(x_4-x_2)(x_4-x_3)$$

§4.3 行列式公式

第一个公式前面出现过：

4A 如果A非奇异，则$A=P^{-1}LDU$，且

$$\det A=\det P^{-1}\det L\det D\det U$$

$$=\pm(\text{主元素的积}).\qquad(3)$$

符号± 1是P^{-1}（或P）的行列式，决定于行交换次数的奇偶。对式中的三角矩阵我们有$\det L=\det U=1$，$\det D=d_1d_2\cdots d_n$。

在2×2情况下，其LDU分解为

$$\begin{bmatrix}a & b\\ c & d\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1 & 0\\ c/a & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}c & 0\\ 0 & (ad-bc)/a\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & b/a\\ 0 & 1\end{bmatrix}\qquad(4)$$

主元素的积为$ad-bc$。如果第一步进行了行交换，则

$$PA=\begin{bmatrix}c & d\\ a & b\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1 & 0\\ a/c & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}c & 0\\ 0 & (cb-da)/c\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & d/c\\ 0 & 1\end{bmatrix}.$$

此时主元的乘积为$-\det A$。

例 §1.6中有限差分矩阵的分解式$A=LDU$为

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & -1 & 2 & \cdot & \\ & & \cdot & \cdot & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ -\frac{1}{2} & 1 & & & \\ & -\frac{2}{3} & 1 & & \\ & & \cdot & \cdot & \\ & & & \frac{1-n}{n} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & & & & \\ & \frac{2}{3} & & & \\ & & \frac{4}{3} & & \\ & & & \cdot & \\ & & & & \frac{n+1}{n} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{2} & & & \\ & 1 & -\frac{2}{3} & & \\ & & 1 & \cdot & \\ & & & \cdot & \frac{1-n}{n} \\ & & & & 1 \end{pmatrix}$$

它的行列式是它的主元的乘积

$$\det A = 2\left(\frac{3}{2}\right)\left(\frac{4}{3}\right)\cdots\left(\frac{n+1}{n}\right)=n+1$$

对一般矩阵（一些特殊的矩阵除外），这是一种计算行列式的方法。事实上，主元是原来分布在矩阵的n^2个元素上的信息的集中。从理论的角度看，信息集中到主元上有一种不利：每一个元素的变化对行列式的影响变得看不出来了。因而我们不满足于公式(3)，要求出一种直接使用n^2个元素的公式。$n=2$时，我们将证明这种公式为$ad-bc$。$n=3$时，大家知道这种公式为

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = +a_{11}a_{22}a_{33}+a_{12}a_{23}a_{31}+a_{13}a_{21}a_{32}$$

$$-a_{11}a_{23}a_{32}-a_{12}a_{21}a_{33}-a_{13}a_{22}a_{31}. \tag{5}$$

我们的要求是根据上节所讲性质1-3直接推出这些公式。先照用于大矩阵的方法推导$n=2$和$n=3$时的公式。有了这两项推导，大矩阵行列式的推导也就不难掌握了。

先把A的每一行都分解成坐标方向上的向量。$n=2$时这种分解为

$$[a\ b]=[a\ 0]+[0\ b],\ [c\ d]=[c\ 0]+[0\ d].$$

再分别对每一行应用线性性质，先对第一行，后对第二行，得

$$\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a & 0 \\ c & d \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 0 & b \\ c & d \end{vmatrix}$$

$$= \begin{vmatrix} a & 0 \\ c & 0 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 0 & b \\ c & 0 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} a & 0 \\ 0 & d \end{vmatrix}$$

$$+ \begin{vmatrix} 0 & b \\ 0 & d \end{vmatrix}. \tag{6}$$

对于$n\times n$矩阵，每一行都可以分解成n个坐标方向上的向量，因而

类似于(6)的表达式中共有n^n项。2×2情况下共有$2^2=4$项。好在这n^n项中多数(如(6)中的首末两项)都自行为零。两行坐标方向相同，则必一行为另一行的倍数，因而行列式为零；有一列全为零，则行列式也为零。例如

$$\begin{vmatrix} a & 0 \\ c & 0 \end{vmatrix}=0 \qquad \begin{vmatrix} 0 & b \\ 0 & d \end{vmatrix}=0.$$

因而，我们只考虑不在同一坐标方向上的行，也即只考虑非零元素不共列的项。设第一列的非零元在第α列上，第二列的非零元在第β列上，最后，第n行的非零元在第ν列上。列号α，β，…，ν互不相同。它们恰恰是数1，2，…，n的一个排列。在3×3情况下排列数为6．对应的项为

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a_{11} & & \\ & a_{22} & \\ & & a_{33} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} & a_{12} & \\ & & a_{23} \\ a_{31} & & \end{vmatrix}$$

$$+\begin{vmatrix} & & a_{13} \\ a_{21} & & \\ & a_{32} & \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} a_{11} & & \\ & & a_{23} \\ & a_{32} & \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} & a_{12} & \\ a_{21} & & \\ & & a_{33} \end{vmatrix}$$

$$+\begin{vmatrix} & & a_{13} \\ & a_{22} & \\ a_{31} & & \end{vmatrix} \qquad (7)$$

3×3情况下的式(6)共有$3^3=27$项，但$3!=6$项以外的项，都因为有坐标方向相同的向量而为零。一般地，第一个列号α有n种取法，第二个列号β有$n-1$种取法。最后一个列号ν就只有一种取法。因而(7)样公式中的项数为$n!$，也即$1,2,\cdots,n$的排列数为$n!$。

(7)中六项，其列号的排列为

$$(\alpha,\beta,\nu)=(1,2,3),\ (2,3,1),\ (3,1,2),\ (1,3,2),$$
$$(2,1,3),\ (3,2,1)$$

这正是(1，2，3)的排列的全体，共$3!=6$个。其中第一个是恒等排列。

现在A的行列式化成了六个简单得多的行列式之和。将a_{ij}提到行列式外面来，则(7)成为

$$
\begin{aligned}
\det A = a_{11}a_{22}a_{33}\begin{vmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & & 1 \end{vmatrix} + a_{12}a_{23}a_{31}\begin{vmatrix} & 1 & \\ & & 1 \\ 1 & & \end{vmatrix} \\
+ a_{13}a_{21}a_{32}\begin{vmatrix} & & 1 \\ 1 & & \\ & 1 & \end{vmatrix} + a_{11}a_{23}a_{32}\begin{vmatrix} 1 & & \\ & & 1 \\ & 1 & \end{vmatrix} \\
+ a_{12}a_{21}a_{33}\begin{vmatrix} & 1 & \\ 1 & & \\ & & 1 \end{vmatrix} + a_{13}a_{22}a_{31}\begin{vmatrix} & & 1 \\ & 1 & \\ 1 & & \end{vmatrix} .
\end{aligned} \qquad (7')
$$

每一项都是遍布于每一行每一列的$n=3$个元素a_{ij}的积。换句话说，经过每一行每一列画一条线，则这条线通过的元素就构成一项。如果所通过的列数为(α, β, …, ν)，则所对应的项就是积$a_{1\alpha}\cdots a_{n\nu}$乘上排列矩阵$P_\sigma$，所有这些项的和就是整个矩阵的行列式。这和就是我们所求的显式公式

$$\det A = \sum_\sigma (a_{1\alpha}a_{2\beta}\cdots a_{n\nu})P_\sigma . \qquad (8)$$

对$n\times n$矩阵，(8)式遍取($1,\cdots,n$)的$n!$个排列$\sigma=(\alpha,\cdots,\nu)$中的每一个。每一个排列决定$a_{ij}$的一种取法，决定一个相应的排列矩阵$P_\sigma$。$P_\sigma$中1的位置同于所在项中$a_{ij}$的位置。

剩下的事情就是计算P_σ的行列式了，P_σ都可以经过行交换变为单位矩阵。行交换只改变行列式的符号，所以$\det P_\sigma$必为$+1$或-1。-1或$+1$决定于行交换次数的奇偶。我们考虑两个例子

$$P_\sigma = \begin{bmatrix} 1 & & \\ & & 1 \\ & 1 & \end{bmatrix}, \text{ 对应的列排列为}(\alpha,\ \beta,\ \nu)=(1,\ 3,\ 2);$$

$$P_\tau = \begin{bmatrix} & & 1 \\ 1 & & \\ & 1 & \end{bmatrix}, \text{ 对应的列排列 } \sigma=(3,\ 1,\ 2).$$

前一个经过一次行交换（二、三两行交换）就变为单位矩阵，因而$\det P_\sigma=-1$。后一个需两次行交换（先一、二两行，再二、三两行）才变为单位矩阵，因而$\det P_\sigma=(-1)^2=1$。这是(5)中六个正负号中的两个。

方程(8)是行列式的一个显式公式。我们就2×2的情形对它进行验证。此时2! =2个排列为$\sigma=(1,\ 2)$和$\sigma=(2,\ 1)$。因而

$$\det A=a_{11}a_{22}\det\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}+a_{12}a_{21}\det\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}$$

$$=a_{11}a_{22}-a_{12}a_{21}=ad-bc.$$

公式(8)并不简单，但由它可以验证行列式性质1－3。性质3，$\det I=1$最简单。a_{ij}的积，只在列号为$(1,\ \cdots,\ n)$的排列时不为零。a_{ij}的积的系数在恒等排列时为1，这一点就是$\det I=1$的验证。性质2留待下一节验证。这里我们最感兴趣的是性质1，即行列式线性地依赖于行a_{11}，a_{12}，…，a_{1n}。为考察这种依赖关系，我们考虑公式(8)中含a_{11}的项，也即考虑列号α取1，其它列号是$(2,\cdots,n)$的某个排列$\sigma'=(\beta,\cdots,\nu)$的项。我们把所有这样的项集中到一起，记为$a_{11}A_{11}$，$a_{11}$的系数为

$$A_{11}=\sum_{\sigma'}(a_{2\beta}\cdots a_{n\nu})\det P_\sigma \qquad (9)$$

类似地，a_{12}也应乘上某个表达式A_{12}。按a_{1j}展开，则公式(8)成为

$$\det A = a_{11}A_{11} + a_{12}A_{12} + \cdots + a_{1n}A_{1n} \tag{10}$$

由(10)可见det$A$线性地依赖于第一行的元素$a_{11}, \cdots, a_{1n}$。性质 i 得到验证，不管系数A_{1j}是什么样的。

例　在3×3情况下，det$A$按a_{1j}的展开式为

$$\det A = a_{11}(a_{22}a_{33} - a_{23}a_{32}) + a_{12}(a_{23}a_{31} - a_{21}a_{33})$$
$$+ a_{13}(a_{21}a_{32} - a_{22}a_{31})。$$

三个括号中依次为“代数余子式”A_{11}，A_{12}，A_{13}。

detA的代数余子式表达式

我们的目的是求出行列式的另外一个公式。(10)就是我们所要的公式，剩下的唯一的一点就是把A_{1j}具体算出来。

我们知道，A_{1j}不依赖于a_{1j}所在的第1行和第j列。而且任何一行任何一列在任何一项里都不能出现两次，我们已把行列式分解成了如下形式的和

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a_{11} & & \\ & a_{22} & a_{23} \\ & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} & a_{22} & \\ a_{21} & & a_{23} \\ a_{31} & & a_{33} \end{vmatrix}$$
$$+ \begin{vmatrix} & & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & \\ a_{31} & a_{32} & \end{vmatrix}.$$

这一分解把n阶行列式化成了$n-1$阶行列式的的和，上式右端出现的就是一些2×2子矩阵。子矩阵M_{1j}是原矩阵划掉第1行第j列的剩下部分，右端的每一项都是a_{1j}与M_{1j}的行列式的乘积加上正号或负号。正负号在式中是交替出现的。代数余子式的表达式为

$$A_{1j} = (-1)^{1+j}\det M_{1j}. \tag{11}$$

例如，上式第二个代数余子式A_{12}的具体表达式为$(-1)^{1+2}\det M_{12}$，算出来为$a_{23}a_{31} - a_{21}a_{33}$。这一算法适用于任何阶数的方阵。由(9)知，$A_{11}$是$A$右下角比$A$低一阶的子阵$M_{11}$的行列式。

将任何一行，譬如第 i 行与第 1 行交换，就可以证明对任何一行都有类似的表达式。

4B A的行列式可以用其第 i 行的代数余子式展开式

$$\det A = a_{i1}A_{i1} + a_{i2}A_{i2} + \cdots + a_{in}A_{in} \qquad (12)$$

来计算。代数余子式A_{ij}是子矩阵M_{ij}的行列式加上正号或负号

$$A_{ij} = (-1)^{i+j}\det M_{ij}.$$

子矩阵M_{ij}是A划去第 i 行第 j 列剩下部分所成的矩阵。

公式(12)将$\det A$表示成了$n-1$阶行列式的组合。由此得知，我们可以用关于 n 的归纳法来定义行列式。对1×1矩阵，我们令$\det A = a_{11}$。由此利用公式(12)，就可以依次地定义 2×2，3×3，以至任何$n\times n$矩阵的行列式。我们选择了用行列式的性质定义行列式，这种定义方法解释起来要简单得多，并由行列式的性质推导出显式公式(8)和归纳公式(12)。

最后，由$\det A = \det A^T$我们得到一个推论：也可以按列的代数余子式将行列式展开。

$$\det A = \sum_{i=1}^{n} a_{ij}A_{ij} \qquad (13)$$

证明方法是将$\det A^T$按第 j 行的代数余子式展开，得到的就是$\det A$的按第 j 列的展开。

例 1 当一些行的元素几乎全都为零时，最宜于使用按代数余子式展开的方法。例如，对三角矩阵

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 3 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & -1 & 0 \\ 6 & 6 & 7 & 2 \end{pmatrix}$$

按第一行展开就只有一项$a_{11}A_{11}$，因为$a_{12}=a_{13}=a_{14}=0$。

$$a_{11}=4, \quad A_{11}=\det\begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 2 & -1 & 0 \\ 6 & 7 & 2 \end{bmatrix}$$

再将A_{11}按第一行展开，得

$$\det A=4A_{11}=4\cdot 3\cdot\det\begin{bmatrix}-1 & 0\\ 7 & 2\end{bmatrix}.$$

进一步展开，得

$$\det A=4\cdot 3\cdot(-1)\det[2]=-24.$$

按最后一列的代数余子式展开，也得到同样的结果。本例告诉我们，任何一个三角矩阵的行列式都等于其对角元素的乘积。

例 2 我们再一次考虑有限差分矩阵

$$A=\begin{pmatrix}2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & -1 & 2 & \cdot & \\ & & \cdot & \cdot & -1\\ & & & -1 & 2\end{pmatrix}.$$

我们按第一行展开来计算$\det A$。第一行中只有两个元素$a_{11}=2$和$a_{12}=-1$不为零。因而

$$\det A=a_{11}A_{11}+a_{12}A_{12}+\cdots+a_{1n}A_{1n}=2A_{11}-A_{12}.$$

A_{11}是A划去第一行和第一列所成，它跟A相同，只是阶数降为$n-1$。另一个代数余子式是由A划去第一行和第二列所成

$$A_{12}=(-1)^{1+2}\det\begin{pmatrix}-1 & -1 & & \\ & 2 & \cdot & \\ & \cdot & \cdot & -1\\ & & -1 & 2\end{pmatrix}.$$

我们按只有一个非零元素的第一列展开A_{12}，得

$$A_{12}=(-1)^{1+2}(-1)\det\begin{bmatrix}2 & \cdot & \\ \cdot & \cdot & -1\\ \cdot & -1 & 2\end{bmatrix}.$$

这又是一个有限差分矩阵，只是阶数降为$n-2$。记$n\times n$矩阵的行列式为D_n，我们得到递推关系式

$$D_n=2A_{11}-A_{12}=2D_{n-1}-D_{n-2}.$$

$n=1$和$n=2$时，易于得到

$$D_1=|2|=2,\qquad D_2=\begin{vmatrix}2 & -1\\ -1 & 2\end{vmatrix}=3.$$

利用递推关系式依次得到$D_3=2D_2-D_1=4$，$D_4=5$。一般地，$D_n=n+1$。

$$D_n=2D_{n-1}-D_{n-2}\text{就成了}n+1=2(n)-(n-1).$$

这跟本节开头算出的$\det A$等于主元的乘积，等于$n+1$是一致的。

练习4.3.1 试对矩阵

$$A=\begin{pmatrix}0 & 1 & 0 & 0\\ 1 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 1\\ 0 & 0 & 1 & 0\end{pmatrix}$$

求出公式(8)中唯一的非零项，即属于不同行不同列的四个非零元素的乘积。并进一步根据排列的奇偶写出$\det A$。

练习4.3.2 试将上题行列式按第一行的代数余子式展开，从而化$\det A$为3×3行列式。进一步再化为2×2行列式。最后算出$\det A$（各步都要注意符号$(-1)^{i+j}$）。

练习4.3.3 试举出一个4×4矩阵，使得

$$\det\begin{bmatrix}A & B\\ C & D\end{bmatrix}\neq\det A\det D-\det B\det C.$$

其中A，B，C，D是2×2子矩阵。如果B或C为零，则等式成立。

练习4.3.4 矩阵

$$A_4=\begin{pmatrix}0&1&1&1\\1&0&1&1\\1&1&0&1\\1&1&1&0\end{pmatrix}$$

的对角元素全为零，非对角元素全为1。试用行运算消元法，或用按第一行代数余子式展开法，或用别的方法计算A_4的行列式。再求出阶数更低的同类型矩阵A_3，A_2的行列式。你能推测出$\det A_n$等于什么吗？

练习4.3.5 试求出

$$A=\begin{bmatrix}1&2&3\\0&4&0\\0&0&5\end{bmatrix}$$

的行列式和全部九个代数余子式。再用A_{ji}作为第i行第j列处的元素构成矩阵B。试验证AB等于单位矩乘上A的行列式。问A^{-1}等于什么？

§4.4 行列式的应用

本节我们逐一讨论本章引言中所说的各项应用。

1. A^{-1}的计算。这里我们要用到第i行的代数余子式展开式

$$\det A=\sum_{j=1}^{n}a_{ij}A_{ij}. \qquad (14)$$

还要用到一行元素对另一行的代数余子式的展开式

$$0=\sum_{j=1}^{n}a_{kj}A_{ij}, \qquad i\neq k \qquad (15)$$

(15)式事实上是另外一个矩阵B的行列式。它是A去掉第i行，并

将第 k 行写在第 i 行上而成。这第 k 行在在 B 中出现两次。B 有两行相等，因而 $\det B=0$ 。(15)式正是 B 按第 i 行的代数余子式展开。与 A 相比较，代数余子式是相同的，但第 i 行元素 a_{ij} 换成了第 k 行的 a_{kj}。

根据(14)和(15)我们可以写出等式

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{11} & A_{21} & \cdots & A_{n1} \\ A_{12} & A_{22} & \cdots & A_{n2} \\ \vdots & \cdot & & \vdots \\ A_{1n} & A_{2n} & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \det A & O & \cdots & O \\ O & \det A & \cdots & O \\ \vdots & \vdots & & \\ O & O & \cdots & \det A \end{pmatrix} \qquad (16)$$

例　称(16)式左端第二个矩阵为转置伴随矩阵，记为 $\operatorname{adj}A$。在 2×2 情况下，$A=\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$ 的代数余子式 $A_{11}=d, A_{12}=-c$，$A_{21}=-b$，$A_{22}=a$，

$$\operatorname{adj} A=\begin{bmatrix} A_{11} & A_{21} \\ A_{12} & A_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix}.$$

此时(16)式成为

$$A\operatorname{adj}A=\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}\begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} ad-bc & 0 \\ 0 & ad-bc \end{bmatrix}=(\det A)I,$$

只要 $\det A$ 不为零，我们就可以用它除等式两边。从而得到

$$A\frac{\operatorname{adj}A}{\det A}=I \qquad 或 \qquad A^{-1}=\frac{\operatorname{adj}A}{\det A} \qquad (17)$$

这矩阵 A^{-1} 的每一个元素都是 A 的一个代数余子式除上 A 的行列式。由此我们得到结论，只要 $\det A\neq 0$ ，A 就可逆。(17)就是 A^{-1}

的精确公式。

2. $Ax=b$的解。第二项应用是$Ax=b$的解

$$x=A^{-1}b=\frac{(\mathrm{adj}A)b}{\det A}.$$

也即$Ax=b$的解是一个矩阵与一个向量的积除上数$\det A$。这个解有一个著名的写法和一个专门的名称。

4C Cramer规则。$x=A^{-1}b$的第j个分量为

$$x_j=\frac{\det B_j}{\det A},\quad 其中\ B_j=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & b_1 & a_{1n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & b_n & a_{nn} \end{bmatrix}. \tag{18}$$

B_j是A的第j列换成向量b而成。

证明 按第j列（它为向量b）的代数余子式将B_j展开，由公式(13)得

$$\det B_j=b_1A_{1j}+b_2A_{2j}+\cdots+b_nA_{nj}.$$

它正是矩阵向量积$(\mathrm{adj}A)b$的第j列。除它以$\det A$，所得就是x的第j个分量。

这样一来，x的每一个分量都是两个行列式的比，也都是一个n阶多项式除以另一个n阶多项式。这一事实有可能从Gauss消去法推出，但没这样推过。

例 方程组

$$x_1+3x_2=0$$
$$2x_1+4x_2=6$$

的解为

$$x_1=\frac{\begin{vmatrix} 0 & 3 \\ 6 & 4 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 4 \end{vmatrix}}=\frac{-18}{-2}=9,\quad x_2=\frac{\begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 2 & 6 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 4 \end{vmatrix}}=\frac{6}{-2}=-3.$$

3. 平行六面体的体积 行列式与体积之间的关系不易想象。我们先假定角都是直角，棱都互相垂直，也即先考虑长方体。长方

体的体积等于棱的乘积，体积$=l_1l_2\cdots l_n$。

我们要从行列式求出这一公式。前面讲过，平行六面体的棱可看作矩阵A的一行。在直角情况下，这些行是互相正交的，从而

$$AA^T=\begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ & & \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_{11} & a_{n1} \\ \vdots & \vdots \\ a_{1n} & a_{nn} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} l_1^2 & 0 & 0 \\ & \ddots & 0 \\ 0 & & \\ 0 & 0 & l_n^2 \end{pmatrix}$$

l_i^2是各行，也即各棱的长。由于各行正交，对角线以外的元素都为零。取行列式，由性质 9 和10，得

$$l_1^2l_2^2\cdots l_n^2=\det(AA^T)=(\det A)(\det A^T)=(\det A)^2.$$

两边开方就得到我们所要的结论：行列式等于体积。$\det A$的符号指明棱所构成的坐标系为“右手系”，如$x-y-z$，或为“左手系”，如y-x-z。

如果平行六面体的面不是矩形，那么其体积将不再等于棱的积。在平面上（如图4.2）

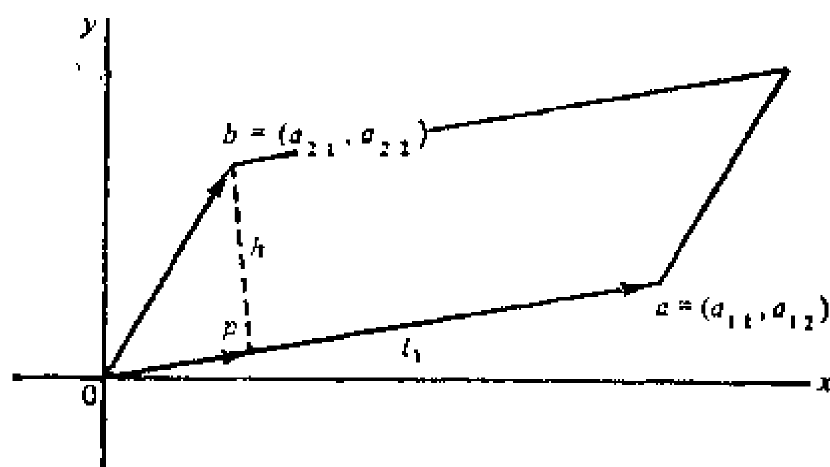


图 4.2 平形四边形的体积$=\det A$

平形四边形的体积（实为面积）等于底l_1（oa的长）乘高h（pb的长），等于以oa，pb为棱的矩形的体积，等于oa，pb的坐标所成矩阵的行列式。要证明平行四边形的体积等于行列式，就只需证明oa，pb所成行列式等于oa，ob所成行列式。事实上，$pb=ob-op$，

op是ob在oa上的投影，是oa的倍数。由行列式的性质5（从A的一行中减去另一行的倍数，$\det A$不变）知oa，$pb(=ob-op)$所成行列式等于oa，ob所成行列式。

将二维时的考虑方式应用到n维。我们依次从第2，3，…，n行减去它在前面各行所成空间上的投影（以此形成相当于二维情形下的高向量pb）。我们称这一过程为Gram-Schmidt过程。该过程最终所得是互相正交的行。这些正交的行所成行列式和所成体积都与原来的相等。而正交情况下体积等于行列式。故原来的一般平行六面体，其体积也等于行列式。

我们已经建立了体积与行列式之间的关系。但再一次回到最简情形，这不无帮助。我们知道

$$\det\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}=1, \quad \det\begin{bmatrix}1 & 0\\ c & 1\end{bmatrix}=1.$$

这两个行列式表示图4.3上两个"平行六面体的体积（这里实际为面积）。左边的是正方形，面积为1；右边的，底为1，高为1，虽然由于系数c，上底"移位"，不再为正方形，它的面积也是1。

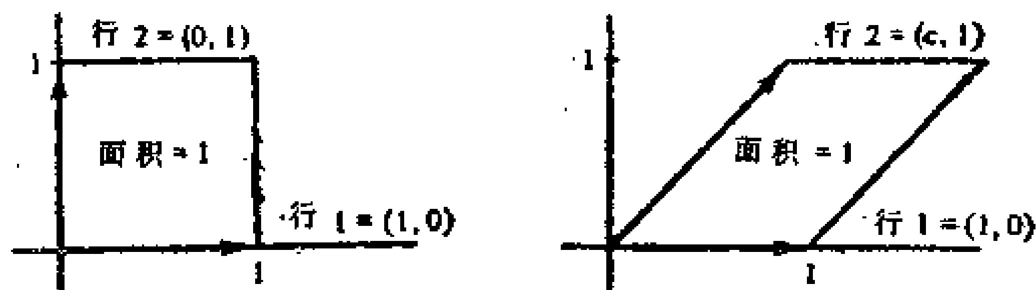


图 4.3　正方形和平行四边行的面积

4．主元公式　最后一项应用（在行列式的这种应用性很强的处理下）是零主元问题。我们将找到高斯消去法的进行可以不经过行交换的条件。关键的一点是前k个主元完全由A左上角的子矩阵A_k决定，完全不受其余的行和列的影响。

例

$$A=\begin{bmatrix} a & b & e \\ c & b & f \\ g & h & i \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} a & b & e \\ o & (ad-bc)/a & (af-ec)/a \\ g & h & i \end{bmatrix}.$$

当然，第一个主元只依赖于第一行第一列，它为$d_1=a$。经过一步消去，显然可见第二个主元为$d_2=(ad-bc)/a$，完全由a，b，c，d决定，不受A的其余部分的影响。实际上，不只是主元，L，D，U的左上角也都由A的相应的左上角所决定

$$A=LDU=\begin{bmatrix} 1 & & \\ c/a & 1 & \\ * & * & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a & & \\ & (ad-bc)/a & \\ & & * \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & b/a & * \\ & 1 & * \\ & & 1 \end{bmatrix}$$

我们看到，前两行前两列部分正是子阵$A_2=\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$的分解（前面公式（4）我们写出过这个分解）。一般规则是

4D 如果A被分解成LDU，则其左上角满足

$$A_k=L_kD_kU_k. \tag{19}$$

也即对每一个k，消去法都在子阵A_k自己的范围内进行。

对该结论的证明，除了照上述分析进行，还可以利用矩阵的分块乘法。也即把矩阵分成块，视每一块为一个元素来进行乘法。按分块乘法$LDU=A$可以写成

$$\begin{bmatrix} L_k & O \\ B & C \end{bmatrix}\begin{bmatrix} D_k & O \\ O & E \end{bmatrix}\begin{bmatrix} U_k & F \\ O & G \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} L_kD_k & O \\ B_kD_k & CE \end{bmatrix}\begin{bmatrix} U_k & F \\ O & G \end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix} L_kD_kU_k & L_kD_kF \\ BD_kU_k & BD_kF+CEG \end{bmatrix}.$$

当然，这个分成的方或长方的块，必须使得这些块之间的乘法能够进

行*。将乘得的矩阵与A相比较，显然可见，它的左上角$L_kD_kU_k$与A_k是相等的，也即(19)成立。

利用这一点我们就可以写出主元公式。取(19)式的行列式，得

$$\det A_k=\det L_k\det D_k\det U_k=\det D_k=d_1d_2\cdots d_k. \qquad (20)$$

也即前k个主元的乘积等于A_k的行列式。我们已经知道，这一结论当$k=n$，也即对整个矩阵$A=A_n$是成立的。由这一规则知A_{k-1}的行列式为$d_1d_2\cdots d_{k-1}$。由此，我们可以把d_k分离出来写成两个行列式的比

$$\frac{\det A_k}{\det A_{k-1}}=\frac{d_1d_2\cdots d_k}{d_1d_2\cdots d_{k-1}}=d_k. \qquad (21)$$

在上面的例子中，第二个主元$(ad-bc)/a$正是A_2与A_1的行列式的比（为方便起见，记$A_0=1$。这样第一个主元就是$a/1=1$）。把全体单个的主元乘起来，我们就得到

$$d_1d_2\cdots d_n=\frac{\det A_1}{\det A_0}\ \frac{\det A_2}{\det A_1}\cdots\frac{\det A_n}{\det A_{n-1}},$$

$$=\frac{\det A_n}{\det A_0}=\det A.$$

由(21)就可以得出对我们所提问题的答案。$\det A_k$全都不为零，则主元全都不为零。

4E 当且只当主子矩阵A_1，A_2，…，A_n全都非奇异的时候，对A进行的消去法才可以不经过行交换，或者不使用排列矩阵，或者不产生零主元。

§4.1末尾提到了性质1-3的相容性。关键的是性质2。性质2说，行交换使行列式反号。我们利用这一性质导出了排列矩阵P_σ的行列式。显式公式(8)中留下的唯一疑点是：用行交换变P_σ为单位矩阵时，行交换次数的奇偶，跟行交换的次序有无关系。如果没有关系，我们就可以把排列矩阵分为“奇”、“偶”两种，由

* 这一方法虽然到现在我们才提到它，但它是极有用处的。

性质 2 知，它们的行列式恒为－1和＋1。

我们来考察排列(3，2，1)。将 3 和 1 交换。经过这样一次交换，该排列就成了按自然数顺序的排列；先将 3 和 2 交换，再将 3 和 1 交换，最后将 2 和 1 交换。经过这样三次交换，该排列也成了按自然数顺序的排列。两种情况下交换的次数都是奇数。可以得出结论：偶数次交换不可能将排列(3，2，1)变成按自然数顺序的排列。

我们来对上述结论进行证明。考察该排列中的每一个数对，记大数在前的数对个数为 N。显然，按自然数顺序的排列(1，2，3)，它的$N=0$。排列(3,2,1)的$N=3$。它的大数在前的数对为(3，2)，(3，1)，(2，1)。我们要证明排列与N同奇偶。换句话说，首先对任何一个排列，每一次交换都使N增加或少一个奇数。其次，变一个排列为按自然数顺序的排列（此时$N=0$）所需交换次数的奇偶同于原排列的N的奇偶。

如果交换的两个数相邻，则N改变 1 或－1，1 和 －1 都是奇数。因而，倘能断言，任何一个交换都可以用奇数个相邻数的交换来完成，我们的证明也就完成了，因为奇数个奇数之和还是奇数。这一断言易于用例子来证实。下面这个排列中第一、第四两个数 2 和 3 交换，可用 5（奇数）个相邻数的交换来完成

$$(2,1,4,3)\to(1,2,4,3)\to(1,4,2,3)$$
$$\to(1,4,3,2)\to(1,3,4,2)\to(3,1,4,2).$$

一般地，使第 k 个数与第 l 个数交换，我们需先用$l-k$次相邻数交换把第k个数换到第 l 个数处，再用$l-k-1$次相邻数交换把原来在 l 处的数（现在在$l-1$处）换到 k 处。而$(l-k)+(l-k-1)$是奇数。我们的断言得到了证实。证明完成了。行列式不仅有前面讲过的各条性质，并且是存在的。

练习4.4.1 利用(17)求A，B的逆矩阵

$$A=\begin{bmatrix}1&1&1\\0&1&1\\0&0&1\end{bmatrix},\qquad B=\begin{bmatrix}a&b\\c&b\end{bmatrix}.$$

练习4.4.2　利用克莱姆规则求x，y，z

$$\begin{aligned}x+4y-z&=1\\x+y+z&=0\\2x\quad+3z&=0\end{aligned}$$

练习4.4.3　求出变直角坐标x，y，z为球面坐标γ，θ，φ的雅可比行列式J。知$x=\gamma\cos\theta\cos\varphi$，$y=\gamma\sin\theta\sin\varphi$，$z=\gamma\sin\varphi$。

练习4.4.4　（a）画出以$A=(2,\ 2)$，$B=(-1,\ 3)$，$C=(0,0)$为顶点的三角形。根据它是平行四边形的一半，解释为什么它的面积

$$\text{面积}(ABC)=\frac{1}{2}\det\begin{bmatrix}2&2\\-1&3\end{bmatrix}.$$

（b）换顶点$C=(0,0)$为$C=(1,-4)$，再推出并验证公式

$$\text{面积}(ABC)=\frac{1}{2}\det\begin{bmatrix}x_1&y_1&1\\x_2&y_2&1\\x_3&y_3&1\end{bmatrix}=\frac{1}{2}\det\begin{bmatrix}2&2&1\\-1&3&1\\1&-4&1\end{bmatrix}.$$

提示：从第一、第二行中减去第三行，得

$$\det\begin{bmatrix}2&2&1\\-1&3&1\\1&-4&1\end{bmatrix}=\det\begin{bmatrix}1&6&0\\-2&7&0\\1&-4&1\end{bmatrix}=\det\begin{bmatrix}1&6\\-2&7\end{bmatrix}.$$

看看新顶点$A'=(1,6)$，$B'=(-2,\ 7)$，$C'=(0,0)$与A，B，C有着怎样的关系？请画图。

练习4.4.5　用体积的计算来解释，为什么对任何的$n\times n$矩阵A有$\det 3A=3^n\det A$。

练习4.4.6　指出

$$A=\begin{bmatrix}2 & 1 & 1\\ 4 & 5 & 0\\ 0 & 6 & -4\end{bmatrix}$$

的主元素，并用消去法求出结果加以验证。需否进行行交换，以避免零主元？

练习4.4.7 变排列$(1,2,\cdots,n)$为$(n,n-1,\cdots,1)$所需交换次数是奇数还是偶数？

练习4.4.8 写出一个变$\sigma(5,3,1,2,4)$为$(1,2,3,4,5)$的具体步骤。σ是奇排列还是偶排列？

练习4.4.9 利用$(1,3,2)$，$(2,4,4)$，$(1,5,2)$所构成的矩阵判断它们是否线性无关。

复 习 题

4.1 为保证4×4矩阵的行列式为零，至少应该让它的哪几个元素为零？

4.2 为保证4×4矩阵的行列式为1，至少应该让它的哪几个元素为零，哪几个元素为1？

4.3 求下面矩阵的行列式

$$\begin{vmatrix}1 & 1 & 1 & 1\\ 1 & 1 & 1 & 2\\ 1 & 1 & 3 & 1\\ 1 & 4 & 1 & 1\end{vmatrix}.$$

4.4 若$B=M^{-1}AM$，则$\det B=\det A$，为什么？

4.5 试举出一个$\det(A+B)=\det A+\det B$的反例。

4.6 矩阵A已给。乘A第一行以3，记所得矩阵为B。再在B中从第二行减去第一行，记所得矩阵为C。问$\det C$与$\det A$有着怎样的关系？

4.7 利用克莱姆规则解方程组$3u+2v=7$，$4u+3v=11$。

4.8 如果A的元素都是整数，且$\det A$为1或-1，则A^{-1}的元素也都是

整数。为什么？

4.9 如果A和A^{-1}的元素都是整数，则$\det A$和$\det A^{-1}$都为1或－1。为什么？提示：$\det A$乘上$\det A^{-1}$得什么？

4.10 求

$$\begin{bmatrix} 3 & 5 \\ 6 & 9 \end{bmatrix}$$

的代数余子式和逆矩阵。

4.11 一平行六面体的四个顶点为(0,0,0)，(－1,2,2)，(2,－1,2)，(2,2,－1)。试求出它的体积和另外四个顶点。

4.12 问5×5矩阵的行列式的展开式含多少项？又问，如果$a_{21}=0$，则有多少项一定为零？

4.13 知A的各行的和都为零，又知列向量x的元素都为1。试求出Ax。又问为什么$\det A=0$？

4.14 问为什么（1，2，…，9）的排列个数为偶数？又问为什么其中恰好一半为奇排列？

第五章　特征值和特征向量

§5.1　引　　言

矩阵论的"后半"部分从这一章开始。矩阵论的"前半"部分差不多全涉及线性方程组$Ax=b$，而且基本技巧是消去法。从现在起，那些技巧只起很小的作用。新的问题仍将通过简化一个矩阵—使它变成对角的或上三角的—来得到解决，但是基本步骤已不再是由一行减去另一行的倍数，我们对保存矩阵的行空间不变不再感兴趣，而有兴趣于保存它的特征值不变。而初等行变换是做不到这一点的。

关于行列式的一章实际上是由老问题$Ax=b$向关于特征值这个新问题的一个过渡。在这两种情形里，行列式都得出一个"形式解"：在$Ax=b$情形中引出Cramer法则，而后一情形引出多项式$\det(A-\lambda I)$，它的根将是特征值（我们强调指出：现在所有的矩阵都是方的；一个长方矩阵的特征值和它的行列式同样没有意义）。如果$n=2$或3，行列式实际上可以用来解决求特征值问题。对大的n，特征值的计算是一个比解$Ax=b$大得多又难得多的任务，甚至Gauss本人也无能为力。但此事可以搁一搁再说。

第一步是解释特征值是什么及它有多大的用途。它们的应用之一是解常微分方程组。我们打算用此来引入特征值。我们将不假设读者熟知微分方程，如果他能够微分通常的函数如x^n，$\sin x$和e^x就足够了。作为一个特殊的例子，考虑两个方程的方程组：

$$\begin{aligned} \frac{dv}{dt} &= 4v-5w \quad 当\ t=0\ 时\quad v=8 \\ \frac{dw}{dt} &= 2v-3w \quad 当\ t=0\ 时\quad w=5 \end{aligned} \qquad (1)$$

这是一个初值问题，不同于§1.6中的边值问题。未知数仅在 $t=0$ 时给定，而不是在一个区间的两端给定；我们对一个瞬时状态比对一个定常状态更有兴趣。这个方程组从给定的初值起适时演变。问题就是求出这个演变规律。

用矩阵形式写出这个方程组是很容易的，令未知向量是 u，它的初值是 u_0 且系数矩阵是 A：

$$u(t)=\begin{bmatrix} v(t) \\ w(t) \end{bmatrix} \qquad u_0=\begin{bmatrix} 8 \\ 5 \end{bmatrix} \qquad A=\begin{bmatrix} 4 & -5 \\ 2 & -3 \end{bmatrix}$$

用此记号，方程组变为

$$\frac{du}{dt}=Au \qquad \text{当 } t=0 \text{ 时} \quad u=u_0 \tag{2}$$

这就是此问题的基本叙述。注意它是一个一阶方程——没有高阶导数出现——而且它关于未知数是线性的。最一般的线性一阶初值问题是

$$\frac{du}{dt}=A(t)u+b(t) \qquad \text{当 } t=0 \text{ 时} \quad u=u_0 \tag{3}$$

通过比较可知，我们的例子(2)式是齐次的($b=0$)，而且它也有一个常数系数，即：矩阵 A 与时间 t 无关。

我们怎样求得这个解？如果只有一个未知数而不是两个，问题将是容易回答的。将得到一个数的而不是向量的微分方程。若方程是常系数齐次的，那么它只能有下列形式：

$$\frac{du}{dt}=au \qquad \text{当 } t=0 \text{ 时} \quad u=u_0 \tag{4}$$

它的解，读者可能是知道的：

$$u(t)=e^{at}u_0 \tag{5}$$

在初始时刻 $t=0$，u 假定取值 u_0。当 $a>0$ 时，方程是不稳定的，当 $a=0$ 时是中性稳定的，而当 $a<0$ 时是稳定的；这个解或者趋于无穷，保持有界或趋于零。若 a 是一个复数 $a=\alpha+i\beta$，则对其实部

α 可以进行相同的检验。它的解是$e^{(\alpha+i\beta)t}u_0$，其虚部产生一个振动$e^{i\beta t}=\cos\beta t+i\sin\beta t$；但是因子$e^{\alpha t}$保证了稳定性。

单个的方程就谈到此。下面我们直接讨论方程组，并寻求类似在纯量情况下，所求出的按指数方式依赖 t 的同一类解。换句话说，我们来寻求下列形式的解

$$v(t)=e^{\lambda t}y$$
$$w(t)=e^{\lambda t}z \tag{6a}$$

或用向量记法

$$u(t)=e^{\lambda t}x \tag{6b}$$

把希望得到的这个解代入微分方程组中，我们得到

$$\lambda e^{\lambda t}y=4e^{\lambda t}y-5e^{\lambda t}z$$
$$\lambda e^{\lambda t}z=2e^{\lambda t}y-3e^{\lambda t}z$$

在各项中有公共因子$e^{\lambda t}$，可以移出消去。所以能消去是由于我们假定两个未知数有相同的指数；如果 v 和 w 对应不同指数函数$e^{\lambda t}$和$e^{\rho t}$，这些因子得出现在方程的两边，消去它们将是不可能的。这样做之后，得到

$$4y-5z=\lambda y$$
$$2y-3z=\lambda z \tag{7}$$

把 $u=e^{\lambda t}x$代入$du/dt=Au$给出$\lambda e^{\lambda t}x=Ae^{\lambda t}x$，且消去公因子后得到

$$Ax=\lambda x \tag{8}$$

这是一个关于特征值 λ 和特征向量 x 的基本方程，注意它是非线性的，因为它涉及两个未知量 λ 和 x 的乘积。如果我们能找到数 λ，则此方程对 x 而言是线性的；事实上，我们可以把λx写成为λIx*，并把它移到方程右边

$$(A-\lambda I)x=0 \tag{9}$$

显然地，特征向量 x 位于矩阵

* 引入单位矩阵仅仅是为了保存矩阵、向量和数量的记法；方程$(A-\lambda)x=0$是简短些，但是含混不清。

$$A-\lambda I=\begin{bmatrix}4-\lambda & -5\\ 2 & -3-\lambda\end{bmatrix}$$

的核内。

这里有一点很关键：对每个 λ 值，向量 $x=0$ 总满足 $Ax=\lambda x$；任何矩阵的核都包含 $x=0$。但是零向量在我们建立形如指数形式 $e^{\lambda t}x$ 的解的问题中是没有用的。于是我们只对那些有非零特征向量 x 的特殊的值 λ 有兴趣。$A-\lambda I$ 的核必须包含某个非零向量才有研究的价值，从而其秩必定小于矩阵的阶数。简言之，$A+\lambda I$ 必须是奇异的。

对此，行列式给出一个确切的检验方法。

5A 数 λ 是 A 的相应于一非零特征向量的特征值，当且仅当

$$\det(A-\lambda I)=0 \tag{10}$$

这个方程叫 A 的**特征方程**。

在我们的例子中，

$$\det\begin{bmatrix}4-\lambda & -5\\ 2 & -3-\lambda\end{bmatrix}=(4-\lambda)(-3-\lambda)+10=\lambda^2-\lambda-2$$

特征多项式 $\lambda^2-\lambda-2$ 分解为 $(\lambda+1)(\lambda-2)$，从而矩阵 A 有两个不同的特征值：$\lambda_1=-1$ 和 $\lambda_2=2$。对这些特殊的值都有相应的特征向量的空间，满足 $Ax=\lambda x$ 或 $(A-\lambda I)x=0$。对 λ_1 和 λ_2 的计算分别进行：

$$\lambda_1=-1;\qquad (A-\lambda_1 I)x=\begin{bmatrix}5 & -5\\ 2 & -2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}y\\ z\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\ 0\end{bmatrix}$$

从而它的解是 $x_1=\begin{bmatrix}1\\ 1\end{bmatrix}$ 的任意倍数；

$$\lambda_2=2;\qquad (A-\lambda_2 I)x=\begin{bmatrix}2 & -5\\ 2 & -5\end{bmatrix}\begin{bmatrix}y\\ z\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\ 0\end{bmatrix}$$

其解为 $x_2=\begin{bmatrix}5\\ 2\end{bmatrix}$ 的任意倍数。

特征向量不是唯一确定的；$A-\lambda I$ 的核（我们称之为相应于 λ

的特征子空间）中任何向量都是特征向量，而我们所要的是这个空间的一组基。在这个例子中，两个特征子空间都是一维的，它们分别由x_1和x_2张成。

回到原来的微分方程，我们已找到它的两个纯指数解：

$$u=e^{\lambda_1 t}x_1=e^{-t}\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix} \quad 和 \quad u=e^{\lambda_2 t}x_2=e^{2t}\begin{bmatrix}5\\2\end{bmatrix}$$

因为这个方程是线性的，齐次的，所以叠加是允许的；这两个特解的任何组合，

$$u=C_1e^{\lambda_1 t}x_1+C_2e^{\lambda_2 t}x_2 \tag{11}$$

仍是一个解。现在我们有两个自由参数C_1和C_2，有理由希望它们可适当选取，使之满足初始条件：当$t=0$时$u=u_0$

$$C_1x_1+C_2x_2=u_0 \tag{12}$$

或

$$\begin{bmatrix}1 & 5\\1 & 2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}c_1\\c_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}8\\5\end{bmatrix} \tag{13}$$

这些常数是$C_1=3$和$C_2=1$，从而原方程（1）所要的解是

$$u(t)=3e^{-t}\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}+e^{2t}\begin{bmatrix}5\\2\end{bmatrix} \tag{14}$$

把两个分量分开来写，这意味着

$$v(t)=3e^{-t}+5e^{2t} \qquad w(t)=3e^{-t}+2e^{2t}$$

初始条件$v_0=8$和$w_0=5$是容易验证的。

看起来解一个方程的关键在于求它的特征值和特征向量。但是这个例子没有说明的是它们的物理意义；它们本身是很重要的，而不仅是求u的一部分技巧。大概最简单的例子*是一队士兵通过桥梁的例子。传统上，他们要停止齐步前进而要散步通过，这个理由是因他们可能以等于桥的特征值之一的频率齐步行进，从而将发生共振（就像孩子的秋千那样，你一旦注意到一个秋千的频率，和此

* 我从不相信其真实性，虽然据说1831年有一桥梁毁于此因。

频率相配，你就使秋千荡得更高）。一个工程师总是试图使他的桥梁或他的火箭的自然频率远离风的频率或液体燃料的频率；而在另一种极端情况，一个证券经纪人则尽毕生精力于努力到达市场的自然频率线。特征值是几乎任何一个动力系统的最重要的特征。

现在我们来综述一下已做了的和需要去做的事情。上述引言已经说明当解方程$du/dt=Au$时，特征值引出特征向量是自然而然的。这样一个方程有“纯指数”解$u=e^{\lambda t}x$；特征值给出增长或衰退率，而特征向量以此比率去发展。其他的解则是这些纯粹的解的叠合，这种叠合使之适合初始条件。

关键的方程是$Ax=\lambda x$。绝大多数x不满足这样一个方程，无论λ是否是特征值。这样一个x，当用A来乘它时将要改变它的方向，所以Ax不是x的倍数。这意味着**只有某些特殊的数λ是特征值，且只有某些特殊的向量是特征向量**。当然，如果A是单位矩阵的倍数，则没有向量被改变方向，从而所有向量都是特征向量，但在一般情形中，特征向量是很少的，而且彼此相距甚远。

例 设想地球作一个任意的旋转，那么总有一个方向是固定不动的，也就是旋转轴。自然并不需要让地球真正那样旋转一下，但是必定有某个北极和南极固定不动*。这两个极就是特征向量——它相应的特征值等于1。一般情形下，其他所有的点都在动，从而没有更多的特征向量可以找到。仅有的例外出现在当旋转360°（这时每一点都是特征向量）或旋转180°。在180的情形中，特征向量布满赤道平面；这个平面上每个方向恰被翻转为相反的方向，因此特征值是-1。这个赤道平面是“二维特征子空间”；单一的特征值$\lambda=-1$有两个无关的特征向量，于是有一个特征向量的平面。

在某些方面这是一个好例子，而在另一些方面则就不是了。与此例相反，特征值一般不是±1；特征向量通常被拉长或缩短。更

---

* 我想这不是那么明显的，但它是正确的——你们不可能转动地球而使它每一点都动。

重要的是，这是R^3中的一个旋转，除了180°和360°之外，**仅有一条特征向量直线而我们希望找到三条**。在对微分方程的应用中，为满足初始条件，我们需要三个不同的特解；一个特征值和一个特征向量是不够的。找出其余两个的途径是允许考虑虚数 i 。如果在实空间R^3中方程的解太少，我们就去具有复分量的向量空间C^3看一看。准许考虑复数的话，任何$n \times n$矩阵都有n个特征值。在§5.2中，我们将对这个旋转的地球找到三个特征值和三个特征向量，而在§5.5中我们将做一个由实向量和矩阵向复数的情况的完整的转化。

但这一章真正的主题是某些其他的东西。已做过的最重要的事情是怎样通过求特征向量来解一个方程组。这些特征向量是这个方程组的“标准样式”，它们的作用是独立的。我们可以分别来看每一个特征向量的作用，然后把它们组合起来去找出方程组的解。用另一种方式来说，就是**底矩阵已被对角化了。**

我们打算在§5.2中叙述对角化理论，而在后面几节中讨论它的应用：首先是对差分方程，Fibonacci数和Markov过程的应用，而后是对微分方程的应用。在每个例子中，我们不得不由计算特征值和特征向量入手，不存在能避开它的捷径。但是而后这些例子则沿如此不同的方向继续下去从至我们不可能把它们综述在一起，唯一能强调说明的是对称矩阵它是特别容易的，而某一类“有缺陷的矩阵”则是特别困难。它们缺乏一个完整的特征向量集，是不能被对角化的，从而在使用“标准样式”技巧上产生障碍。当然，这些矩阵必须要讨论，但是我们不打算在本书中涉及此事。

为结束这个引言，我们回顾一下关于特征值和特征向量：$Ax=\lambda x$的某些最基本的事实。给定一个$n \times n$矩阵，问题是求出这样的特殊向量x，使得A在其上的作用象一个简单的乘法即：Ax与x有相同的方向。这个办法的第一步是求特征值，把λx写成λIx，并且把这一项移到左边：$(A-\lambda I)x=0$。A的特征向量就是$A-\lambda I$的化零向量。换句话说，关键的问题在于：如果A通过减去单

位矩阵的各种不同的倍数而变化，那么**哪些变化可使它成为奇异的？**这些变化将显露出特征值；然后我们就可以计算特征向量。

如果A本身已是奇异的，则一种可能性是不需要再改变它了。一个奇异矩阵的特征值之一是$\lambda=0$，并且核包含有相应的特征向量。但是与本书的前半部分不同，A是奇异的这件事并没有任何特殊：它的全部含义就是$\lambda=0$是一个特征值。无论A是否是奇异的，它的所有的特征值都处于相同的地位：组合式$A-\lambda I$是奇异的，并且这个组合式的核是相应于λ的特征向量空间。

为了确定$A-\lambda I$何时是奇异的，我们来计算它的行列式。这个行列式是λ的n次多项式，称为A的**特征多项式**。方程$\det(A-\lambda I)=0$是**特征方程**，而它的根λ_1，λ_2，…，λ_n（它可以是也可以不是实数，并且同一个λ可以有也可以没有某个重数）是A的特征值。总括起来

5B 下列的每一个条件都是λ为A的一个特征值的充要条件：

（1）存在一个非零向量x使得$Ax=\lambda x$。

（2）矩阵$A-\lambda I$是奇异的

（3）$\det(A-\lambda I)=0$

例 考虑对称矩阵

$$A=\begin{bmatrix}1&-1&0\\-1&2&-1\\0&-1&1\end{bmatrix}$$

它的特征多项式是

$$\det(A-\lambda I)=\begin{vmatrix}1-\lambda&-1&0\\-1&2-\lambda&-1\\0&-1&1-\lambda\end{vmatrix}=-\lambda^3+4\lambda^2-3\lambda$$

于是特征方程是

$$-\lambda^3-4\lambda^2-3\lambda=-\lambda(\lambda-1)(\lambda-3)=0$$

从而特征值都是实的且各不相同：$\lambda_1=0$，$\lambda_2=1$，$\lambda_3=3$。我们分别对每个特征值求相应的特征向量x_i：

$$\lambda_1=0:\ (A-0I)x_1=\begin{bmatrix}1&-1&0\\-1&2&-1\\0&-1&1\end{bmatrix}x_1=\begin{bmatrix}0\\0\\0\end{bmatrix}$$

$$\text{且}\quad x_1=\begin{bmatrix}1\\1\\1\end{bmatrix}$$

$$\lambda_2=1:\ (A-I)x_2=\begin{bmatrix}0&-1&0\\-1&1&-1\\0&-1&0\end{bmatrix}x_2=\begin{bmatrix}0\\0\\0\end{bmatrix}$$

$$\text{且}\ x_2=\begin{bmatrix}1\\0\\-1\end{bmatrix}$$

$$\lambda_3=3:\ (A-3I)x_3=\begin{bmatrix}-2&-1&0\\-1&-1&-1\\0&-1&-2\end{bmatrix}x_3=\begin{bmatrix}0\\0\\0\end{bmatrix}$$

$$\text{且}\ x_3=\begin{bmatrix}1\\-2\\1\end{bmatrix}$$

这些大量的计算是不可避免的，并且第一次我们当然要选取一个好的例子．差不多的三次多项式不象我们所做的那样容易被分解。毫无疑问，特征值问题在代数上及计算上都是比$Ax=b$要困难的多的问题。对于一个线性方程组，有限个消去法步骤在有限时间内就能得出精确的答案（或等价地说，Cramer法则给出解的精确公

式）。而在特征值的情形，则不可能存在这样的步骤和这样的公式，或者说，使Galois死不瞑目的是：5×5矩阵的特征多项式是五次的，而他证明了不可能存在关于五次多项式求根的代数公式。人们所能做的全部事情只是对**已经求出**的特征值给出某些简单的核实方法，我们列举其中的两种。

5C n个特征值之和等于A的n个对角元素之和：

$$\lambda_1+\lambda_2+\cdots+\lambda_n=a_{11}+a_{22}+\cdots+a_{nn}$$

这个和叫做A的**迹**（trace）而且这n个特征值的乘积等于A的行列式。

这可用上面的例子来验证一下。在此例中，A的迹是$0+1+3=1+2+1=4$，而行列式是$0\cdot1\cdot3=0$。

练习5.1.1° 求矩阵$A=\begin{bmatrix}1 & -1\\ 2 & 4\end{bmatrix}$的特征值和特征向量。验证：迹等于特征值的和，而行列式等于它们之积。

练习5.1.2 对上述的A，求解微分方程

$$du/dt=Au, \qquad u_0=\begin{bmatrix}0\\ 6\end{bmatrix}.$$

练习5.1.3 设我们由上述A减去$7I$：

$$B=A-7I=\begin{bmatrix}-6 & -1\\ 2 & -3\end{bmatrix}$$

B的特征值和特征向量是什么？它们与A的特征值和特征向量有什么关系？

练习5.1.4 使用上面已求过特征值和特征向量的3×3矩阵为例，选取常数C_i使得解$u=C_1e^{\lambda_1t}x_1+C_2e^{\lambda_2t}x_2+C_3e^{\lambda_3t}x_3$满足初始条件$u_0=(1\ 3\ 1)^T$

不要把矩阵的特征值和它的对角元素混为一谈。通常它们是完全不同的。虽然如此，我们宁可冒引入一些混淆的危险，指出一种情形，在那种情形中这两类数是相同的。

5D 如果矩阵A是三角的——它可以是上三角的，也可以是

下三角的，并且特别的，它可以是对角的——则特征值λ_1，λ_2…，λ_n恰与对角线元素a_{11}，a_{22}，…，a_{nn}相同。

从一个例子就可以看出这个理由是明显的。如果

$$A=\begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & \frac{3}{4} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

则它的特征多项式是

$$\det\begin{pmatrix} 1-\lambda & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & \frac{3}{4}-\lambda & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & \frac{1}{2}-\lambda \end{pmatrix}=(1-\lambda)\left(\frac{3}{4}-\lambda\right)\left(\frac{1}{2}-\lambda\right)$$

行列式恰是对角元素的乘积。显然，它的根是$\lambda=1$，$\lambda=\frac{3}{4}$和$\lambda=\frac{1}{2}$；这些特征值都已位于主对角线上。

练习5.1.5 求这个三角矩阵的特征向量，并求下列对角矩阵的特征值和特征向量

$$A=\begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}.$$

在这些例子中，通过查看对角线就可找出特征值，因此这些例子指出了整个这一章的主题：把A变换成一个对角的或三角矩阵，而不改变它的特征值。我们一再强调高斯分解$A=LU$不适合于这个目的。U的特征值可以在对角线上找到，但它们不是A的特征

值。

还有一种情形，在这种情形下计算也是容易的。假设我们已经找到了矩阵A的特征值和特征向量，**则A^2的特征值恰是λ_1^2，λ_2^2，$\cdots\lambda_n^2$，而且A的每个特征向量也是A^2的特征向量**。其证明在数学上也是典型的：如果我们试图去讨论$det(A^2-\lambda I)$，那么就会陷于繁杂的计算，但是如果从$Ax=\lambda x$入手，全部事情则是很明显的，再用A来乘一次

$$A^2x=A\lambda x=\lambda Ax=\lambda^2x$$

于是λ^2是A^2的一个特征值，它的特征向量是同一个x。如果第一次用A去乘不改变x的方向，则第二次也不会改变。

当涉及两个矩阵时，这个道理不能使用。假设λ是A的特征值，μ是B的特征值，**则一般说来$\lambda\mu$不是AB的一个特征值**。一个试图的说明是这样的：若$Ax=\lambda x$且$Ax=\mu x$则$ABx=A\mu x=\mu Ax=\mu\lambda x$。其错误在于假定$A$和$B$有公共的特征向量$x$，一般说来，它们是不同的。

练习5.1.6　举例说明当把矩阵的一行减去另一行的倍数时，特征值可能改变。

练习5.1.7　设λ是A的一个特征值且x是相应的特征向量：$Ax=\lambda x$

(a)证明这个x也是$B=A-7I$的特征向量并求出相应的特征值。

(b)设$\lambda\neq0$，证明x也是A^{-1}的一个特征向量，并求其特征值。

练习5.1.8　设特征多项式被分解为

$$\det(A-\lambda I)=(\lambda_1-\lambda)\cdots(\lambda_n-\lambda) \qquad (15)$$

通过适当选取λ的值来证明行列式等于特征值的乘积。

练习5.1.9　分两步来证明迹等于特征值的和。第一步求出(15)式右端中$(-\lambda)^{n-1}$的系数。其次，找出在

$$\det(A-\lambda I)=\det\begin{pmatrix} a_{11}-\lambda & a_{12} & \cdots\cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22}-\lambda & \cdots\cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & \cdots & \cdots & a_{nn}-\lambda \end{pmatrix}$$

展开式中涉及$(-\lambda)^{n-1}$的所有项。解释为什么它们都来自所有主对角线元素乘积这一项中，并找出(15)左端$(-\lambda)^{n-1}$的系数。比较之。

练习5.1.10 (*a*) 构造两个2×2矩阵，使得AB的特征值不等于A的特征值与B的特征值的乘积，而且$A+B$的特征值也不是原来特征值的和。

(*b*) 验证$A+B$的特征值的和等于A，B原来特征值的和，并且乘积也如此。为什么这是正确的？

练习5.1.11 通过比较A和A^T的特征多项式，证明它们有相同的特征值。

练习5.1.12 求$A=\begin{bmatrix} 3 & 4 \\ 4 & -3 \end{bmatrix}$的特征值和特征向量。

练习5.1.13 对

$$A=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

求其特征值，并验证它们的和是迹。

§5.2 一个矩阵的对角形式

我们立即开始一个实质性的计算。它完全是简单的而且在这一章的每一节中都将使用，

5E 设$n\times n$矩阵A有n个线性无关的特征向量，那么如果

这些向量选作为矩阵S的列向量，则$S^{-1}AS$是一个对角矩阵Λ，它的对角线元素就是A的特征值：

$$S^{-1}AS=\Lambda=\begin{bmatrix}\lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_n\end{bmatrix} \tag{16}$$

证明 把特征向量x_i排成S的列，每一次计算积AS的一列：

$$AS=A\begin{bmatrix} | & | & & | \\ x_1 & x_2 & \cdots & x_n \\ | & | & & | \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} | & | & & | \\ \lambda_1x_1 & \lambda_2x_2 & \cdots & \lambda_nx_n \\ | & | & & | \end{bmatrix}$$

然后把最后一个矩阵按一种完全不同的方式进行分解：

$$\begin{bmatrix} | & | & & | \\ \lambda_1x_1 & \lambda_2x_2 & \cdots & \lambda_nx_n \\ | & | & & | \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} | & | & & | \\ x_1 & x_2 & \cdots & x_n \\ | & | & & | \end{bmatrix}\begin{bmatrix}\lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_n\end{bmatrix}$$

单纯把它看成是矩阵乘法的练习。关键在于是按正确顺序来排列这两个矩阵。如果Λ不是放在S之后而放在S之前，那么λ_1将乘以第一行的各个元素，而我们希望它乘以第一列。因此正确的乘积是$S\Lambda$。于是

$$AS=S\Lambda\text{或}S^{-1}AS=\Lambda\qquad\text{或}A=S\Lambda S^{-1} \tag{17}$$

矩阵S是可逆的，因为它的列向量（特征向量）假定是线性无关的。

在给出任何例题和应用之前，我们再作四点注记。

注1 如果矩阵A没有多重特征值——数$\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$是不同的——则$n$个特征向量自然是无关的(见下面的5F)。于是**任何具有两两不同的特征值的矩阵可以对角化。**

注2 对角化的矩阵S不是唯一的。首先一个特征向量x乘一个常数后仍是一个特征向量，于是我们可以用任何非零常数乘S的

各列，从而造出一个新的使之对角化的 S 。多重特征值有更大的自由度，而且对于平凡的例子 $A = I$ ，任何可逆矩阵 S 都使 $S^{-1}IS$ 是对角的（这个对角矩就就是 I ）。这反映了所有向量都是单位矩阵的特征向量这一事实。

注3 方程 $AS=S\Lambda$ 仅当 S 的列向量组就是 A 的特征向量组时成立。其他的矩阵 S 不能得出对角阵 Λ。其理由在于矩阵乘法的法则。假设 S 的第一列是 y，则 $S\Lambda$ 的第一列就是 $\lambda_1 y$。如果这与 AS 的第一列相同，AS 的第一列按矩阵乘法可知是 Ay。则 y 必定是一个特征向量：$Ay=\lambda_1 y$。事实上，S 中特征向量出现的顺序和 Λ 中特征值的顺序自然是一致的。

注 4 并非所有的矩阵都有 n 个线性无关的特征向量，从而并非所有矩阵都是可对角化的。一个“有病态的矩阵”的标准例子是

$$A=\begin{bmatrix}0 & 1\\ 0 & 0\end{bmatrix}$$

它的特征值是 $\lambda_1=\lambda_2=0$ 。因为它是三角的：

$$\det(A-\lambda I)=\det\begin{bmatrix}-\lambda & 1\\ 0 & -\lambda\end{bmatrix}=\lambda^2$$

如果 x 是一个特征向量，则它必定满足

$$\begin{bmatrix}0 & 1\\ 0 & 0\end{bmatrix}x=\begin{bmatrix}0\\ 0\end{bmatrix} \quad 或 \quad x=\begin{bmatrix}x_1\\ 0\end{bmatrix}$$

显然 $\lambda=0$ 是一个二重特征值——它的**代数重数**为 2 ——但它只有一个一维特征向量空间。这个特征值的**几何重数**是 1 ，从而我们选不出 S 来。

这里有一个关于 A 不能对角化的更直接的证明。因为 $\lambda_1=\lambda_2=0$ ，Λ 必须是一个零矩阵。但是如果 $S^{-1}AS=0$ ，则我们左乘 S ，右乘 S^{-1}，便得出 $A=0$ 。因为 A 不是 0 ，这个矛盾就证明了没有 S 能使 $S^{-1}AS=\Lambda$

某些具有多重特征值的矩阵是可以被对角化的(例如 $A=I$)；

而其他的则是不行的。仅要做的检验是计算所有的特征向量，并查看它们是否足够多。当特征值两两不同时，这没有什么困难，这时代数重数和几何重数均为1。但是如果一个特征值λ是m重的，则一切都要看$A-\lambda I$的核而定：只有当有m个相应的特征向量时，检验才能通过。当所有的特征值都通过了这种检验时，就有了一个完整的特征向量集合，从而A可对角化。

为完成这一系列的想法，我们还必须证明一个有用的，但并不很令人振奋的定理。

5F 如果非零特征向量x_1，x_2，…，x_k对应不同的特征值λ_1，λ_2，…，λ_k，则这些特征向量是线性无关的。

先设$k=2$，且设x_1和x_2的一个线性组合是零：$C_1x+C_2x=0$用A来乘，我们得出$C_1\lambda_1x_1+C_2\lambda_2x_2=0$。由此方程减去前一方程的$\lambda_2$倍，向量$x_2$不出现了：

$$C_1(\lambda_1-\lambda_2)x_1=0$$

因为$\lambda_1\neq\lambda_2$且$x_1\neq0$，我们得出$C_1=0$。类似地，$C_2=0$，从而两个向量是无关的；因为只有平凡的组合给出零向量。

相同的论证可扩展到任意多个特征向量的情形：我们假定某个组合得零，用A去乘，再减去原组合的λ_k倍，从而向量x_k不再出现——剩下一个得零的x_1，…，x_{k-1}的组合。重复相同的步骤（或者说用数学归纳法）我们最终得到一个等于零的x_1的倍数，这就保证$C_1=0$，从而最终每个$C_i=0$。于是属于不同特征值的特征向量自然是线性无关的。

练习5.2.1 对矩阵

$$A=\begin{pmatrix}1&-1&0\\-1&2&-1\\0&-1&1\end{pmatrix}$$

求S并计算$S^{-1}AS$。另外将$B=\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}$也对角化。

练习5.2.2 求一个矩阵A，它的特征值是1和4，而且它的特征向量分别是$\begin{bmatrix}3\\1\end{bmatrix}$和$\begin{bmatrix}2\\1\end{bmatrix}$（提示$A=S\Lambda S^{-1}$）。

练习5.2.3 求矩阵

$$A=\begin{pmatrix}1&1&1\\1&1&1\\1&1&1\end{pmatrix}$$

的特征值和特征向量，并写出两个不同的使之对角化的矩阵S来。

练习5.2.4 通过把$S^{-1}AS=\Lambda$转置，求出使A^T对角化的矩阵以及它所得到的对角矩阵。

练习5.2.5 如果A，B有相同的特征向量矩阵S使得$A=S\Lambda_1S^{-1}$和$B=S\Lambda_2S^{-1}$，证明$AB=BA$（回想起$\Lambda_1\Lambda_2=\Lambda_2\Lambda_1$因为它们是对角的）。若$A=\begin{bmatrix}1&1\\1&1\end{bmatrix}$，求出一个这样的$B$的例子。

上述练习在量子力学中是重要的：具有相同特征向量的矩阵必定可交换。其逆也是正确的，而且甚至是更重要的：**若$AB=BA$则这两个矩阵有相同的特征向量**。关键的步骤是注意到$Ax=\lambda x$蕴含着$ABx=BAx=B\lambda x=\lambda Bx$。于是$x$和$Bx$是同一个$\lambda$的特征向量。而且如果我们为了简便假定$A$的特征值是两两不同的——特征子空间是一维的——则$Bx$必是$x$的一个倍数。换句话说$x$也是$B$的特征向量，这就完成了证明。

在本章的引言中，我们谈到过地球的旋转。一个90°的旋转只令一个方向不变：连接极点的轴是我们可能找到的仅有的特征向量。在赤道平面上，x轴转成为y轴，而y方向变成原来的负x方向。如果地球上一点的坐标原来是(x_0,y_0,z_0)，则旋转后他们是$(-y_0,x_0,z_0)$。容易看出：坐标的这种变化可以用矩阵乘法来表出：

$$\begin{pmatrix} -y_0 \\ x_0 \\ z_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \\ z_0 \end{pmatrix}$$

我们打算把这个旋转矩阵A对角化。第一步是找出它的特征值和特征向量，从特征多项式开始

$$\det(A-\lambda I) = \begin{vmatrix} -\lambda & -1 & 0 \\ 1 & -\lambda & 0 \\ 0 & 0 & 1-\lambda \end{vmatrix} = (1-\lambda)(\lambda^2+1)$$

这个多项式的根是特征值，而且**虽然这个矩阵是实的但它的特征值中间有两个是虚的**：

$$\lambda_1 = 1 \qquad \lambda_2 = i \qquad \lambda_3 = -i$$

因为它们是不同的（甚至还是虚的！），矩阵当然是可以对角化。于是必定有一个完整的特征向量集，并且和通常一样被算出：

$$\lambda_1 = 1: \quad (A-I)x_1 = \begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} x_1 = 0 \qquad x_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

这个特征向量正好是南北轴，它是固定不动的。

$$\lambda_2 = i \qquad (A-iI)x_2 = \begin{pmatrix} -i & -1 & 0 \\ 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 1-i \end{pmatrix} x_2 = 0$$

$$\text{或} \qquad x_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\lambda_3 = -i \qquad (A+iI)x_3 = \begin{pmatrix} i & -1 & 0 \\ 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 1+i \end{pmatrix} x_3 = 0$$

$$\text{或}\quad x_3=\begin{pmatrix}1\\ i\\ 0\end{pmatrix}$$

于是使 i 对角化的 S 和对角阵 Λ 是

$$S=\begin{pmatrix}0 & 1 & 1\\ 0 & -i & i\\ 1 & 0 & 0\end{pmatrix}, \qquad \Lambda=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & i & 0\\ 0 & 0 & i\end{pmatrix}$$

前面的理论保证 $S^{-1}AS$ 与 Λ 相同。

在这个例子中我们可以了解 A^2 的意义。几何上，它是一个 180° 的旋转；也就是 A 作用两次的结果。代数上，$A=S\Lambda S^{-1}$ 导出 $A^2=S\Lambda S^{-1}S\Lambda S^{-1}=S\Lambda^2S^{-1}$。这就确信了我们所已知的，即：$A$ 与 A^2 有相同的特征向量矩阵 S，而且每个特征值被平方。一个 180° 旋转的特征值是 $1^2=1$，$i^2=-1$ 和 $(-i)^2=-1$，-1 的重数使我们确信整个赤道平面被翻转了过来。我们可以继续计算 A^4，它是一个 360° 的完全的旋转。

$$A^4=S\Lambda S^{-1}S\Lambda S^{-1}S\Lambda S^{-1}SAS^{-1}=SA^4S^{-1}$$

想起 $i^4=1$，特征值矩阵是 $\lambda^4=I$，而且 $A^4=SIS^{-1}=I$。一个 360° 的旋转就是单位变换。

练习5.2.6 你能找到 90° 旋转矩阵 A 的平方根 R，并验证 $R^2=A$ 吗？回想起 R 和 R^2 有相同的特征向量，换句话说，S 是相同的。实际上存在真正可能的平方根 R，因为 $\sqrt{+1}=\pm1$，$\sqrt{i}=\pm(1+i)/\sqrt{2}$，$\sqrt{-i}=\pm(1-i)/\sqrt{2}$

练习5.2.7 确定 $A=\begin{bmatrix}1 & 1\\ -1 & -1\end{bmatrix}$ 是否有两个特征向量，从而可以被对角化，还是只有一个特征向量而不能对角化。

§5.3 差分方程和幂A^k

差分方程不象微分方程那样广为人知，虽然它应该是那样。它以有限步长一步一步推算的。而微分方程则从无限的步长无穷多步推算的——但是这两种理论是绝对保持平行的。这与在数学中反复出现的离散的与连续的相类似。大概最好的解释是下面的例子，它实际上不涉及n维线性代数，因为银行中的钱只有一个数量。

假定你以6%的利率投资1000美元为期五年。如果一年结算一次，则本钱乘以1.06且$P_{k+1}=1.06P_k$。这是一个以一年为时间步长的差分方程。它把$k+1$年以后的本钱与前一年的本钱联系起来，而且它容易求解：5年以后，原来的本钱$P_0=1000$已乘了5次，从而

$$P_5=(1.06)^5P_0=(1.06)^5\cdot 1000=1338\text{美元}$$

现在假定时间步长改为一个月，新的差分方程是$P_{K+1}=(1+0.06/12)P_K$。5年或60个月以后

$$P_{60}=\left(1+\frac{0.06}{12}\right)^{60}P_0=(1.005)^{60}\cdot 1000=1349\text{美元}$$

下一步是结算日利息：

$$\left(1+\frac{0.06}{365}\right)^{5\times 365}\cdot 1000=1349.83$$

最后为了最彻底地刺激储户，银行现在提供连续的结算。利息每瞬间都在增加，从而差分方程失效了。事实上你可以希望会计不懂微积分，从而不能算出他应付给你多少钱。但是有两种不同的可能性：或者他可以越来越频繁地结算利息并看出它的极限是

$$\left(1+\frac{0.06}{N}\right)^{5N}\cdot 1000\to e^{.30}\cdot 1000=1349.87(\text{美元})$$

或者他采用微分方程，它是差分方程$P_{K+1}=(1+0.06\triangle t)P_K$的极

限。把P_k移到左边并除以时间间隔$\triangle t$，

$$\frac{P_{k+1}-P_k}{\Delta t}=0.06P_k \quad \text{趋于} \quad \frac{dp}{dt}=0.06p$$

它的解是$P(t)=e^{0.06t}P_0$，从而5年后总计1349.87美元。既使按瞬时去结算，本钱仍保持有限而且差别只有4美分。

这个例子包含了差分方程和微分方程两者，而当时间步长不再出现时，前者变成后者。但是也有许多差分方程，它们是独立存在的，我们的第二个例子就来源于著名的Fibonacci数列：

$$0,1,1,2,3,5,8,13,\cdots$$

大概读者已看出这个规律：每个Fibonacci数是它前面两个Fibonacci数的和，

$$F_{k+2}=F_k+F_{k+1} \tag{18}$$

这是一个差分方程，它出现于各种各样想象不到的应用中，因此值得单独写一本书。树木上的刺和叶子按一种螺旋的样式生长在树上。在山楂、苹果或橡树上，绕着茎每两圈可以找出5个生长物。梨树每3圈有8个，而柳树就更复杂了，每5圈有13个。而冠军大概是Danid T. O'Connell的向日葵了（《科学美国人》1951年11月份），它的种子选择了一个几乎令人难以置信的比例$F_{12}/F_{13}=144/233$*。

我们怎样才能不是从$F_0=0$，$F_1=1$出发，一步一步地推出F_{1000}而求出第一千个Fibonacci数呢？这个办法是解差分方程$F_{k+2}=F_{k+1}+F_k$，而且作为第一步这个方程可以转化为一个"一步方程"$u_{k+1}=Au_k$。这个类似于本息增长率，$P_{k+1}=1.06P_k$，不同的是现在未知量必须是一个向量而因子A必须是一个矩阵；若

---

* 关于这些植物学的应用，请参看DArcy Thompson的书《On Growth and Form》（*Cambridge Univ. Press, London and New York,* 942）或Peter Slevens的《*Patterns in Nature*》（*Little, Brown,* 1974），F_n的数百种应用已刊于《*Fibonacci Quarterly*》，Fibonacci本人是第一个把阿拉伯数字引入欧洲的，大概在公元1200年左右。

$$u_k=\begin{bmatrix}F_{k+1}\\ F_k\end{bmatrix}$$

则

$$\begin{aligned}F_{k+2}&=F_{k+1}+F_k\\ F_{k+1}&=F_{k+1}\end{aligned}\quad \text{变成}\quad u_{k+1}=\begin{bmatrix}1&1\\1&0\end{bmatrix}u_k.$$

这个变换对任何S阶方程都是一个标准的设计：$s-1$个如$F_{k+1}=F_{k+1}$那样的平凡的方程与给定的方程组成一个一步方程。对于Fibonacci方程来说，$S=2$。

形式上，差分方程$u_{k+1}=Au_k$是容易解的。因为每一步引起一次用A去乘。**解u_k与初值u_0由关系式$u_k=A^k u_0$联系起来。**问题在于寻求某种快速计算幂A^k的方法，从而求出第1000个Fibonacci数。关键是A的特征值和特征向量：

5G 若A可对角化，$A=S\Lambda S^{-1}$，则自然有

$$u_k=A^k u_0=(S\Lambda S^{-1})(S\Lambda S^{-1})\cdots(S\Lambda S^{-1})u_0=S\Lambda^k S^{-1}u_0 \tag{19}$$

除了第一个S与最后一个S^{-1}，每个S^{-1}取去一个S。S的列向量是矩阵A的特征向量x_i，从而由矩阵乘法引出

$$u_k=(x_1\cdots x_n)\begin{bmatrix}\lambda_1^k&&\\&\ddots&\\&&\lambda_n^k\end{bmatrix}S^{-1}u_0=c_1\lambda_1^k x_1+\cdots+c_n\lambda_n^k x_n \tag{20}$$

一般解是特解$\lambda_i^k x_i$的一个组合，相应于初始条件u_0的组合系数c_i是

$$c_1\lambda_1^0 x_1+\cdots+c_n\lambda_n^0 x_n=u_0\text{或}Sc=u_0\text{或}c=S^{-1}u_0 \tag{21}$$

这些公式实际上给出同一个解$u_k=S\Lambda^k S^{-1}u_0$的两个不同的途径。由第一个公式(19)可看出A^k与$S\Lambda^k S^{-1}$是相同的，从而我们可以到此为止。但是第二种途径更清楚地显示了与解微分方程的类似性：代替纯指数函数解$e^{\lambda_i t}x_i$，现在我们有纯幂解$\lambda_i^k x_i$。"基本成份"仍是特征向量x_i，而且在每一步中它们被扩大特征值λ_i倍。把这些特解按与u_0相符的方式组合起来，我们重新得到正确的解$u_k=$

$S\Lambda^k S^{-1}u_0$

在任何一个像Fibonacci 方程这样的特定的例子中，第一步都是把矩阵A对角化：

$$A=\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix},\qquad \det(A-\lambda I)=\lambda^2-\lambda-1.$$

$$\lambda_1=\frac{1+\sqrt{5}}{2},\qquad \lambda_2=\frac{1-\sqrt{5}}{2}.$$

$$A=S\Lambda S^{-1}=\begin{bmatrix}\lambda_1 & \lambda_2\\ 1 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\lambda_1 & \\ & \lambda_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & -\lambda_2\\ -1 & \lambda_1\end{bmatrix}\frac{1}{\lambda_1-\lambda_2}.$$

一旦这些特征值和特征向量被求出，便可使用公式(19)。始值$F_0=0$，$F_1=1$给出$u_0=\begin{bmatrix}1\\ 0\end{bmatrix}$，而且

$$\begin{bmatrix}F_{k+1}\\ F_k\end{bmatrix}=u_k=A^k u_0=S\Lambda^k s^{-1}u_0$$

$$=\begin{bmatrix}\lambda_1 & \lambda_2\\ 1 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\lambda_1^k & \\ & \lambda_2^k\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\ -1\end{bmatrix}\frac{1}{\lambda_1-\lambda_2}.$$

Fibonacci数F_K是这个乘积的第二个分量：

$$F_k=\frac{\lambda_1^k}{\lambda_1-\lambda_2}-\frac{\lambda_2^k}{\lambda_1-\lambda_2}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{5}}\left[\left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^k-\left(\frac{1-\sqrt{5}}{2}\right)^k\right].$$

这就是我们所要的答案。在某种意义上它是更令人惊奇的，因为Fibonacci 法则$F_{k+2}=F_{k+1}+F_k$总是必定得出整数，而我们却以分数和方根表示其结果。它们中的某些部分必定相消而余下一个整数。事实上，因为第二项$[(1-\sqrt{5})/2]^k/\sqrt{5}$总是小于$\frac{1}{2}$的，它与第一项合并，必定得到最接近第一项的整数。相减的结果只余下整数部分，从而

$$F_{1000} = \text{最接近于} \frac{1}{\sqrt{5}}\left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^{1000} \text{的整数，}$$

当然这是一个巨大的数字，而且F_{1001}将更大。很清楚，分数部分与此整数部分相比越来越微不足道；比值F_{1001}/F_{1000}必定非常接近于$(1+\sqrt{5})/2 \approx 1.618$，希腊人称这个数为“黄金中值”*。换句话说，$\lambda_2^k$与$\lambda_1^k$相比是微不足道的，而且比值$F_{k+1}/F_k$趋于$\lambda_1^{k+1}/\lambda_1^k = \lambda_1$。

练习5.3.1 假若Fibonacci从$F_0 = 1$和$F_1 = 3$开始它的序列，而后面仍采用相同的法则$F_{k+2} = F_{k+1} + F_k$。求新的初始向量u_0，新的系数$C = S^{-1}u_0$和新的Fibonacci数。证明比值F_{k+1}/F_k仍趋于黄金中值。

练习5.3.2 如果每个数是它前面两个数的中值，$G_{k+2} = \frac{1}{2}(G_{k+1} + G_k)$，给出矩阵$A$并将其对角化。由$G_0 = 0$和$G_1 = \frac{1}{2}$开始，求出$G_k$的公式，并计算当$n \to \infty$时它的极限。

练习5.3.3 Bernadelli研究这一类甲虫，“它只能活3年，而且在第3年繁殖”。如果年龄一岁的组以$\frac{1}{2}$的概率存活，两岁的组以$\frac{1}{3}$概率存活，而3岁的甲虫生6个雌虫后死去，相应的矩阵为

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 6 \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} & 0 \end{pmatrix}$$

证明$A^3 = I$。若开始时每组有3000个甲虫，求6年的甲虫分布。

马尔科夫过程

在第一章中有一个关于加利福尼亚洲人口迁入，迁出的练习，它值得再来看一看。有这样的规律：

每一年，加州以外人口的$\frac{1}{10}$迁入加州，而加州人口的$\frac{2}{10}$迁出。

---

* 最优雅的矩形其两边之比为1.618比1。

这给出一个差分方程：开始时，外部人口为y_0而内部人口为z_0，一年以后有

$$\frac{9}{10}y_0+\frac{2}{10}z_0=y_1 \qquad \text{外部人口}$$

$$\frac{1}{10}y_0+\frac{8}{10}z_0=z_1 \qquad \text{内部人口}$$

或 $$\begin{bmatrix} y_1 \\ z_1 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 0.9 & 0.2 \\ 0.1 & 0.8 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} y_0 \\ z_0 \end{bmatrix}$$

当然这个问题是凭空想象的，但是它有两个实质的性质，我们称为Markov(马尔科夫)过程。人口总数保持不动，而且外部和内部的人口数决不能负的*。这第一个性质反映在下面事实中：矩阵每一列加起来为1；每个人都被计算在内，而没有人被重复或丢失。而第二个性质则反映在下面事实中：矩阵没有负元素；同样地y_0和z_0是非负的，从而y_1和z_1，y_2和z_2等等均也如此。幂A^k都是非负的。

我们打算先解这个特殊的差分方程，（使用公式$S\Lambda^{K-1}Su_0$）然后看一看人口是否最终达到一个“稳定的状态”，最后对Markov过程作一般性讨论。开始计算时A必须是对角化：

$$A=\begin{bmatrix} 0.9 & 0.2 \\ 0.1 & 0.8 \end{bmatrix} \qquad \det(A-\lambda I)=\lambda^2-1.7\lambda+0.7$$

$$\lambda_1=1 \qquad \text{和} \qquad \lambda_2=0.7$$

$$A=S\Lambda S^{-1}=\begin{pmatrix} \frac{2}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} & -\frac{1}{3} \end{pmatrix}\begin{bmatrix} 1 & \\ & 0.7 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -2 \end{bmatrix}$$

---

* 不仅如此，历史状况也被完全置之度外，即：每一个新的状态u_{K+1}仅依赖于前一个u_K，而u_0，…，u_{K-1}的记录可以抛开不管。大概我们的生命也是Markov过程的例子，但我希望不是如此。

现在我们可以求出A^k和k年之后的分布

$$\begin{bmatrix} y_k \\ z_k \end{bmatrix} = A^k \begin{bmatrix} y_0 \\ z_0 \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{2}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} & -\frac{1}{3} \end{pmatrix} \begin{bmatrix} 1^k & \\ & (0.7)^k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_0 \\ z_0 \end{bmatrix}$$

$$= (y_0 + z_0) \begin{pmatrix} \frac{2}{3} \\ \frac{1}{3} \end{pmatrix} + (y_0 - 2z_0)(0.7)^k \begin{pmatrix} \frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} \end{pmatrix}.$$

这就是我们所要的解，而且容易看出经过了很长一个时期以后将会出现什么情形：因为$(0.7)^k$变得非常小，从而这个解达到一个极限状态

$$\begin{bmatrix} y_\infty \\ z_\infty \end{bmatrix} = (y_0 + z_0) \begin{pmatrix} \frac{2}{3} \\ \frac{1}{3} \end{pmatrix}$$

总人口仍是$y_0 + z_0$，与开始时一样，但在此极限中，人口的$\frac{2}{3}$在加州之外，而$\frac{1}{3}$在加州之内。无论初始分布是什么样的这总是正确的。读者可以看出这个稳定状态恰是练习1.3.3中所要的分布；如果这一年由$\frac{2}{3}$外部人口和$\frac{1}{3}$内部人口开始，那么它到最终仍是这样：

$$\begin{bmatrix} 0.9 & 0.2 \\ 0.1 & 0.8 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \frac{2}{3} \\ \frac{1}{3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{2}{3} \\ \frac{1}{3} \end{pmatrix} \quad 或 \quad Au_\infty = u_\infty$$

这个稳定状态是A相应于$\lambda = 1$的特征向量。用A去乘保持u_∞不变。而这样去乘使我们由一个时间间隔转向下一个间隔。

一个Markov过程的上述描述完全是有条件的：人口按一个固定的比例迁徙*。但是如果我们代之考察单独的一个人，那么迁徙的规律被赋予一个概率的解释。如果这个人在加州之外，则他迁入的概率是$\frac{1}{10}$；若他在加州内，则他迁出的概率是$\frac{2}{10}$。他的迁徙就成为一个随机过程，支配它的矩阵A叫做**转移矩阵**。我们不可能确定地知道他住在什么地方。但是每一年$u_k=A^k u_0$的分量说明了他在州外的概率和他在州内的概率。这些概率加起来为1——但他必定在某地——而且他们不能是负的，这又把我们引回到转移矩阵的两个基本性质：每一列加起来是1，而且每个元素满足$a_{ij}\geqslant 0$。

这个理论的关键步骤是解释为什么$\lambda=1$总是一个特征值，以及为什么它的特征向量是稳定状态。第一点是容易解释的：$A-I$的每一列加起来等于$1-1=0$。于是$A-I$的所有行加起来是一个零行，它们一定是相关的，$A-I$是奇异的，从而$\lambda_1=1$是一个特征值。除了非常特殊的情况之外，u_k最终将趋于相应的特征向量。这可以由公式$u_k=C_1\lambda_1^k x_1+\cdots\cdots+C_n\lambda_n^k x_n$看出。在这个公式中，没有一个特征值可以大于1；否则概率u_k将如Fibonacci数那样越来越大，这是不可能的。如果其它的所有特征值严格地小于$\lambda_1=1$，则公式中的第一项将完全处于支配地位；其它的λ_i^k将迅速地趋于0，从而$u_k\to c_1x_1=u_\infty$。如果矩阵A不仅是非负的而是实际上是正的$a_{ij}>0$，那么这个稳定状态是确定的，则向量c_1x_1只有正的分量，它们加起来等于1，而且它们是Markov过程的极限概率。

练习5.3.4 假设有三个大型运货卡车中心。每个月中，在波士顿和在洛杉矶的卡车的一半开往芝加哥，而其余一半留在原地。而在芝加哥的卡车分成相等的两半分别去波士顿和洛杉矶。给出3×3转移矩阵并求相应于特征值$\lambda=1$的稳定状态。

练习5.3.5 假定有一种传染病，在每个月内，健康人的一半

---

* 如果每个在外部的人都迁入，而且一个内部的人都迁出，则每年人口都颠倒，从而稳定状态是不可能出现的，这时转移矩阵$A=\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}$从而$-1$和$1$同是特征值。

会染上病，而病人的$\frac{1}{4}$会死亡，求相应Markov过程的稳定状态。

$$\begin{bmatrix} d_{k+1} \\ s_{k+1} \\ w_{k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & \frac{3}{4} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_k \\ s_k \\ w_k \end{bmatrix}$$

（d，s，w分别表示死人，病人和健康人——译注）

练习5.3.6 假定给定的一代人或者是优势遗传的，混合的或是隐性遗传的——遗传基因决定眼睛的颜色或者两个是棕色的，一棕一蓝，或者两个蓝色——分别具有概率d_0，h_0，r_0（我想在混合情形下，两个眼睛实际上看起来是是棕色的，但是无论如何父亲的两个基因可能被同等地继承下来）。若所有的妇女假定都是混合的*，则由母亲继承来的基因是棕或蓝的具有相同的概率。求对下一代的一个儿子，给定概率d_1，h_1和r_1的矩阵A

$$\begin{pmatrix} d_1 \\ h_1 \\ r_1 \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} d_0 \\ h_0 \\ r_0 \end{pmatrix}$$

$a_{11}=a_{21}=\frac{1}{2}$，因为来自父亲的基因必定是棕的。经过无限多代之后，极限分布u_{∞}是什么？

稳 定 性

Fibonacci 数和Markov 过程之间存在着一个明显的差别：数F_k变得越来越大，而根据定义任何“概率”在0和1之间。Fibonacci方程是不稳定的，而且结算利息方程 $P_{k+1}=1.06P_k$ 也是不稳定的；本钱永远保持增长。如果Markov 概率减少至零则方程将成

* 实际上不会是这样的，我希望能谅解这个假定。

为稳定的；但是不可能如此，因为在每个状态下它们加起来必须是1，于是Markov 过程是中性稳定的（neutrally stable）。

现设给定一个差分方程 $u_{k+1}=Au_k$，我们希望研究当 $k\to\infty$ 它的属性。设 A 可被对角化，则这个解 u_k 将是一些纯解的组合。

$$u_k=S\Lambda^kS^{-1}u_0=c_1\lambda_1^kx_1+\cdots+c_n\lambda_n^kx_n$$

u_k 的滋长由因子 λ_i^k 支配着，因此**稳定性依赖于A的特征值**。

5H 一个差分方程 $u_{k+1}=Au_k$ 当它的所有特征值 $|\lambda_i|<1$ 时，它是稳定的，而且 $u_k\to 0$，当所有 $|\lambda_i|\leqslant 1$ 时，它是中**性稳定的**且 u_k 有界。而当至少有一个特征值 $|\lambda_i|>1$ 时，它是不稳定的，而且 u_k 是无界的。

例1 矩阵

$$A=\begin{pmatrix}0 & 4\\ 0 & \frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

当然是稳定的，因为 A 是上三角的，所以它的特征值是位于主对角线上元素 0 和 $\frac{1}{2}$。由任何一个初始向量 x_0 出发，由法则 $u_{k+1}=Au_k$ 得出，这个解必定最终趋于零：

$$u_0=\begin{bmatrix}0\\ 1\end{bmatrix},\quad u_1=\begin{pmatrix}4\\ \frac{1}{2}\end{pmatrix},\quad u_2=\begin{pmatrix}2\\ \frac{1}{4}\end{pmatrix},\quad u_3=\begin{pmatrix}1\\ \frac{1}{8}\end{pmatrix},$$

$$u_4=\begin{pmatrix}\frac{1}{2}\\ \frac{1}{16}\end{pmatrix}\cdots$$

读者可以看到较大的特征值是如何支配着这种衰减的；在第一步之后，每个向量 u_k 是前一个的一半。而第一步的实际作用是把 u_0 分成 A 的两个特征向量。

$$\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}8\\1\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}-8\\0\end{bmatrix}$$

而且把第二个（相应于$\lambda=0$）向量化零。第一个向量在每一步乘以$\lambda=\frac{1}{2}$。

注 既使A有很小的特征值从而非常稳定，向量u_k在开始时长度还是增大了，直到u_4才变得比u_0短了。而且衰减以一个几何比率继续下去。为保证一个直接的衰减，使得$\|u_1\|<\|u_0\|$或$\|Au\|<\|u\|$对任何一个非零起始向量u都成立。我们需要

$$\|Au\|^2=u^TA^TAu\leqslant\|u\|^2=u^Tu\text{或}u^T(A^TA-I)u<0 \tag{22}$$

这是一个比关于特征值$|\lambda_i|\leqslant 1$的条件更严的要求。用第六章的术语来说，这意味着A^TA-I是负定的，（它的特征值均负）而用第七章的术语来说这表示A的“模”小于1。

练习5.3.7 如果对角线上方元素$a_{12}=4$换为$a_{12}=\sqrt{3}/2$——A^TA-I有负特征值——证明存在一个直接的衰减。

练习5.3.8 对方程组$V_{n+1}=\alpha(V_n+W_n)$和$W_{n+1}=\alpha(V_n+W_n)$，什么样的α值产生不稳定性？

例2 经济发展的von Neumann模型。我们来研究一个简单的模型，在此模型中有三种“商品”：钢铁、粮食和劳动力。每一种商品的生产要消耗这一年以前所生产的一部份商品，经济学家的问题是经济能否（和以什么样的速度）发展。假设新生产一个单位的钢铁要用0.4单位的库存钢铁和0.5单位劳动力，一单位粮食要用0.1单位粮食和0.7单位劳力，而产生（或维持）一个单位劳力需要0.8单位粮食、0.1单位钢铁和0.1单位劳力。则输入量s_0，f_0和l_0与产出量S_1，f_1和L_1由下列矩阵联系起来：

$$u_0=\begin{pmatrix}s_0\\f_0\\L_0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0.4&0&0.1\\0&0.1&0.8\\0.5&0.7&0.1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}s_1\\f_1\\L_1\end{pmatrix}=Au_1$$

注意这个差分方程是反向的！代替$u_1=Au_0$。我们有$u_0=Au_1$，所以A^{-1}的特征值必定比A的特征值更能支配经济的发展。但是这个问题还有第二个曲折，因为钢铁，粮食和劳动力不能出现负的量：von Neumann想要求出速度α的最大值，以此速度，经济可以发展而且保持非负，即$u_1 \geqslant \alpha u_0 \geqslant 0$。

如果从钢铁，粮食和劳力的一个向量u_0出发，至少到αu_0为止这些不等式均成立，则由u_1开始的下一年至少生产αu_1或至少是$\alpha^2 u_0$。于是经济至少可以以速度α继续发展。当然如果最大可能的α小于1，它必定与经济发展相矛盾——而且如果A是一个Markov矩阵，则将有一个平衡状态，这时$\alpha=1$。事实上，von Neumann的理论非常接近Markov的理论，因为在这两种情况下，矩阵A都是非负的——这保证了它的最大特征值λ_1是非负的，从而它相应的特征向量的分量也如此。在Markov的情形下，因为$\lambda_1=1$，所以$\alpha=1$；在每种情形中，我们都有$\lambda_1=\frac{1}{\alpha}$，因为von Neumann证明了给出最快发展速度的总是非负的特征向量。在本例中$\lambda_1=\frac{9}{10}$，所以它的发展速度为$\frac{10}{9}$。特征向量是

$$x=\begin{pmatrix} 0.2 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

而且 $$Ax=\begin{pmatrix} 0.4 & 0 & 0.1 \\ 0 & 0.1 & 0.8 \\ 0.5 & 0.7 & 0.1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0.2 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0.18 \\ 0.9 \\ 0.9 \end{pmatrix}=0.9x.$$

练习5.3.9 用经济术语来解释为什么增大“消耗矩阵”A的任何元素都必定增大它的最大特征值λ_1（从而减缓发展速度）？

例3 Leontief的投入-产出矩阵。与von Neumann不同，Leontief首先考虑了在单独一年内的生产和消耗。它的投入-产出系统是数学经济中首先获得巨大成功的理论之一。为解释它，我们

保留原先的消耗矩阵A，而来问一问能否达到一个给定的生产向量y：我们能否最终得到y_1单位钢铁，y_2单位粮食和y_3单位劳力？为做到这一点，这些商品必须生产出一个较大的数量x_1，x_2和x_3，因为这些产品的一部分在生产过程中被消耗掉。事实上消耗总量恰是Ax，而纯产品是$x-Ax$。

问题 求x使得

$$x-Ax=y \qquad \text{或} \qquad x=(I-A)^{-1}y$$

表面上看，我们仅仅是问$I-A$是否可逆，但是对这个问题仍然存在非负的要求：我们假定所求的向量$y\geqslant 0$，而且要求产品向量$x\geqslant 0$。于是实际的问题是是否$(I-A)^{-1}$有非负的元素：因此乘积$(I-A)^{-1}y$将大于或等于零。从数学上看，对给定的一个具有最大特征值λ_1的消耗矩阵。此理论关键的结果是：$(I-A)^{-1}$是非负的当且仅当$\lambda_1<1$。在此情况下，这种经济可以生产商品的任一种组合；如果特征值是正的，则产品多于消耗。

例 设$A=\begin{bmatrix} 0 & 2 \\ 2 & 0 \end{bmatrix}$，这使得生产一单位钢铁消耗两单位粮食，生产一单位粮食消耗两单位钢铁，则我们什么东西也生产不出来！这最大特征值是$\lambda_1=2$，而且

$$(I-A)^{-1}=-\frac{1}{3}\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \qquad \text{每个元素都是负的.}$$

练习5.3.10 通过逐项相乘验证$(I-A)\cdot(I+A+A^2+\cdots)=I$这个无穷级数表示$(I-A)^{-1}$，倘若它有有限和且$A$非负，则这个级数也是非负的。而保证它有有限和的条件是$\lambda_1<1$。对消耗矩阵

$$A=\begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

将此级数求和，并验证它等于$(I-A)^{-1}$。

Leontief理论的思想核心在于找出一个来源于实际经济的真

实数据的模型来；1958年美国官方统计表中包含83种工业，其中每一种都提出一个完整的产品和消耗的"交易表"。而理论本身也扩展到$(I-A)^{-1}$以外，去决定自然价格和最优化问题；通常，劳动力应作为一种原始商品而单独分出来，而它是有限制供应而且应是极小化的。另外经济当然不总是线性的。

§5.4 微分方程和指数函数e^{At}

无论你解什么样的方程组，那怕是一个单独的方程，矩阵理论总有它的作用。对于差分方程这是对的，这时其解$u_k=A^ku_0$依赖于A的幂。对微分方程这同样是对的，这时它的解$u(t)=e^{At}u_0$依赖于A的指数函数。为定义这个指数函数并解释它，我们先讨论一个例子

$$\frac{du}{dt}=Au=\begin{bmatrix}-2 & 1\\ 1 & -2\end{bmatrix}u \tag{23}$$

第一步总是求特征值和特征向量：

$$A\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}=(-1)\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix},\quad A\begin{bmatrix}1\\-1\end{bmatrix}=(-3)\begin{bmatrix}1\\-1\end{bmatrix}$$

然后有几种得出相同答案的方法。大概最好的方法是写出一般解，而后使其满足$t=0$时的初始向量u_0：

$$u(t)=c_1e^{\lambda_1t}x_1+c_2e^{\lambda_2t}x_1=c_1e^{-t}\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}+c_2e^{-3t}\begin{bmatrix}1\\-1\end{bmatrix} \tag{24}$$

$$u_0=c_1\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}+c_2\begin{bmatrix}1\\-1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}c_1\\c_2\end{bmatrix}$$

你们可看出特征向量矩阵S。而且系数$\begin{bmatrix}c_1\\c_2\end{bmatrix}=S^{-1}u_0$与差分方程

是相同的。把它们代回(24)中去，问题得解。用矩阵形式来写，这个解是

$$u(t)=\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}e^{-t} & \\ & e^{-3t}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}c_1\\ c_2\end{bmatrix}=S\begin{bmatrix}e^{-t} & \\ & e^{-3t}\end{bmatrix}S^{-1}u_0$$

这就是本节的基本公式：$Se^{\Lambda t}S^{-1}u_0$是微分方程的解，就如$S\Lambda^kS^{-1}u_0$是差分方程的解一样。关键的矩阵是

$$\Lambda=\begin{bmatrix}-1 & \\ & -3\end{bmatrix}\quad 和 \quad e^{\Lambda t}=\begin{bmatrix}e^{-t} & \\ & e^{-3t}\end{bmatrix}$$

现在我们可以慢慢地来讨论。

关于这个例子还有两件事要做。一是完成这个理论的数学部分：给出指数函数e^{At}的直接定义，使其与公式$Se^{\Lambda t}S^{-1}$相符。另一件事是给出这个方程和其解的物理解释。这是一类很有用的微分方程。

首先，我们由指数函数着手。定义它的最自然的方法是仿造e^x的幂级数

$$e^x=1+x+\frac{x}{2!}+\frac{x}{3!}+\cdots$$

而

$$e^{At}=1+At+\frac{(At)^2}{2!}+\frac{(At)^3}{3!}+\cdots$$

e^{At}是一个$n\times n$矩阵，它的微分是

$$\frac{d}{dt}\left(e^{At}\right)=A+\frac{A^2(2t)}{2!}+\frac{A^3(3t^2)}{3!}+\cdots$$

$$=A\left(I+At+\frac{(At)^2}{2!}+\cdots\right)=Ae^{At}$$

所以下列结论自然是正确的：$e^{At}u_0$是这个微分方程的解：当$t=0$时，它得到初始向量u_0，而且它满足方程$d(e^{At}u_0)/dt=Ae^{At}u_0$。

于是它必定与我们的另一个解$Se^{\Lambda t}S^{-1}u_0$相等。为用更直接的方式来证明这个相等的关系，我们回顾一下$A=S\Lambda S^{-1}$的幂为$A^k=(S\Lambda S^{-1})\cdots(S\Lambda S^{-1})=S\Lambda^kS^{-1}$，于是关于指数函数的无穷级数成为

$$e^{At}=I+S\Lambda S^{-1}t+\frac{S\Lambda^2S^{-1}t^2}{2!}+\frac{S\Lambda^3S^{-1}t^3}{3!}+\cdots$$

$$=S\left(I+\Lambda t+\frac{(\Lambda t)^2}{2!}+\frac{(\Lambda t)^3}{3!}+\cdots\right)S^{-1}$$

$$=Se^{\Lambda t}S^{-1}$$

这就完成了数学部分，这些结果汇总如下

5I 若A可对角化，$A=S\Lambda S^{-1}$，则微分方程$du/dt=Au$有解

$$u(t)=e^{At}u_0=Se^{\Lambda t}S^{-1}u_0 \tag{25}$$

S的列是A的特征向量，使得

$$u(t)=[x_1\cdots x_n]\begin{bmatrix}e^{\lambda_1 t} & & \\ & \ddots & \\ & & e^{\lambda_n t}\end{bmatrix}S^{-1}u_0=c_1e^{\lambda_1 t}x_1+\cdots+c_ne^{\lambda_n t}x_n \tag{26}$$

一般解是特解$e^{\lambda_i t}x_i$的一个线性组合，相应于初始条件u_0的系数c_i是$c=S^{-1}u_0$。

这与差分方程是完全类似的——读者可与5G比较一下。在这两种情况下我们都假定A是可对角化的，不然的话它只有不到n个特征向量，从而我们不能找到足够的特解。丢失的解是存在的，但它们比指数$e^{\lambda t}x$更为复杂，它们涉及“广义特征向量”和如$te^{\lambda t}$这样的因子。但是公式$u(t)=e^{At}u_0$仍是正确的*。

现在我们转向讨论这个例子的物理意义。它很容易解释，同时，是很重要的。这个微分方程描述了一个扩散过程。它可以想象为把一

* 这种不完备情况的讨论放在附录B中，但是很容易给出一个例子。若$y'=z$，$z'=0$，则方程组是$\frac{du}{dt}=Au=\begin{bmatrix}0&1\\0&0\end{bmatrix}u$ 所以$A^2=0$且$e^{At}=I+At=\begin{bmatrix}1&t\\0&1\end{bmatrix}$

个无限长的筒管分为四段，其中中间两段是有限的，两端两段是半无限的（图5.1）

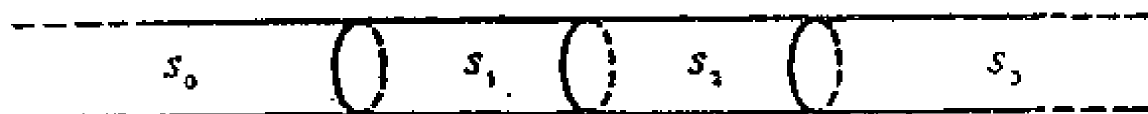


图 5.1 传播模型

在 $t=0$ 时，两个有限段落中包含有某种化学溶液的浓缩物 v_0 和 w_0。与此同时，在任一时刻，两个无限部分中的浓度总是零，因为它有无限体积，这将是对这些无限段落中平均浓度的正确描述，即使化学物质开始扩散以后也是如此。扩散从 $t=0$ 开始，它受下列法则支配：在每个时刻 t，两个相邻段落之间的扩散速度等于它们浓度之差。我们设想，在每个段落中间，浓度保持均匀。这个过程在时间上是连续的而在空间上是不连续的，在两个内部段落 S_1 和 S_2 中只有两个未知量 $v(t)$ 和 $w(t)$。

浓度 v 依两种方式变化：扩散到左边的段落 S_0 和扩散到 S_2 或被 S_2 扩散回来。于是净扩散速度是

$$\frac{dv}{dt}=(w-v)+(0-v)$$

因为 S_0 中的浓度永远是零。类似地

$$\frac{dw}{dt}=(0-w)+(v-w)$$

于是方程组恰与我们的例子（23）相符：

$$u=\begin{bmatrix}v\\w\end{bmatrix},\quad \frac{du}{dt}=\begin{bmatrix}-2v+w\\v-2w\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-2&1\\1&-2\end{bmatrix}u.$$

特征值 -1 和 -3 将支配解的状态。它们给出浓度降低的速度，而且 λ_1 将是更重要的，因为只有一些特殊的初始条件可以导出以 e^{-3t} 的速度"超衰减"。事实上，这些条件必定来源于特征向量 $(1,-1)$，而它的两个分量是符号相反。如果实验仅允许非负的浓度，超衰减

是不可能的而且最终速度一定是e^{-t}。以此速度衰减的解相应于特征向量（1,1），于是当$t\to\infty$时，两个浓度将接近相等。

对此例有一个进一步的说明：这个例子是对一个由偏微分方程

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\qquad u(0)=u(1)=0$$

所描述的连续扩散过程的一种，是对只有两个未知数的不连续情况的近似。通过保持两个无限段落上浓度为0，而且把管道中间部分越分越小，长度为$h=\frac{1}{N}$的小段落来逐步逼近它。这个具有N个未知数的离散方程组由下列矩阵决定：

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} -2 & 1 & & \\ 1 & -2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & 1 \\ & & 1 & -2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix}=Au$$

这恰是在1.6节作为$\frac{d^2}{dx^2}$（与$\frac{-d^2}{dx^2}$反号）的一个逼近而构造的有限差分矩阵。化学上更小心的观察将引入一个纯量因子$1/h^2$，所以令$h\to0$和$N\to\infty$时，我们导出偏微分方程$\partial u/\partial t=\frac{\partial^2 u}{\partial^2 x^2}$。它就是著名的热传导方程。它的解也仍可扩展成这个问题的标准模式；但它们不再是具有N个分量的特征向量，而是特征函数。事实上它们恰是函数$\sin n\pi x$，而热传导方程的一般解则是

$$u(t)=\sum_{n=1}^{\infty}c_n e^{-n^2\pi^2 t}\sin n\pi x$$

系数c_n仍然由初始条件决定，而且衰减速度是特征值$\lambda_n=-n^2\pi^2$。

练习5.4.1 计算上述例子中的2×2矩阵e^{At}，并证明当$t>0$时它的元素是正的。任何由正浓度开始的试验仍保持正的；若$u_0>0$，则$e^{At}u_0>0$*

练习5.4.2 假设在扩散方程中，时间方向被颠倒过来：du/dt

* 当A的对角线上方元素是正的时候是如此。

$=Au$变成$du/d(-t)=Au$，或

$$\frac{du}{dt}=Bu=\begin{bmatrix}2 & -1\\ -1 & 2\end{bmatrix}u_0 \qquad u_0=\begin{bmatrix}1\\ 0\end{bmatrix}$$

计算$u(t)$并且证明当$t\to\infty$时，代替衰减是扩大起来。（在连续的情形中，当我们离开$t=0$时这种扩大立刻出现，热传导方程在时间上是不可逆的，从而你不能使分子的扩散恢复原状！）

练习5.4.3 为造一个连续的Markov过程，我们堵塞无限段落S_2和S_3，而得出方程

$$\frac{dv}{dt}=w-v \qquad \frac{dw}{dt}=v-w \qquad \text{或} \quad \frac{du}{dt}=\begin{bmatrix}-1 & 1\\ 1 & -1\end{bmatrix}u=Au$$

求其一般解，满足初始条件$v=3$和$w=1$的解以及当$t\to\infty$的稳定状态。注意微分方程的$\lambda=0$相应于差分方程的$\lambda=1$（$e^{0t}=1$）而且它的特征向量支配稳定状态。

练习5.4.4 用一种不同的方法来导出公式$u(t)=se^{\Lambda t}s^{-1}u_0$，即在微分方程$du/dt=Au$中换变量$v=s^{-1}u$。求新的$v_0$，解关于$v$的方程然后再回到$u$来。

练习5.4.5 假设你可将A对角化，由(25)证明$e^{tA}e^{sA}=e^{(t+s)A}$，用一个2×2的反例证明，一般说来$e^B\cdot e^C\neq e^{B+C}$；数字指数法则在矩阵情况下失效。

微分方程的稳定性

与差分方程一样，当$t\to\infty$时，决定$u(t)$将处于什么状态的是特征值。只要A可对角化，则这个微分方程将有n个纯指数函数解，而且任何特解$u(t)$是它们的某个线性组合。

$$u(t)=Se^{\Lambda t}S^{-1}u_0=c_1e^{\lambda_1 t}x_1+\cdots+c_ne^{\lambda_n t}x_n$$

其稳定性受因子$e^{\lambda_i t}$的支配。若它们都趋于零，则$u(t)$也趋于零；若它们都保持有界，则$u(t)$也保持有界；而且若它们之一膨胀变

大，则除了非常特殊的始值条件外，其解也膨胀变大。不仅如此，因为$e^{\lambda t}$的大小（或者说是模）仅仅依赖于λ的实部，故支配稳定性的仅是实部。若$\lambda=\alpha+i\beta$，则

$$e^{\lambda t}=e^{\alpha t}e^{i\beta t}=e^{\alpha t}(\cos\beta t+i\sin\beta t) \qquad 且\ |e^{\lambda t}|=e^{\alpha t}$$

当$\alpha<0$时它衰减，则$\alpha=0$它不变，而当$\alpha>0$时它膨胀变大，而虚部β则产生纯粹的振动。对任何可对角化的A，这就证明了：

5J 若所有$\mathrm{Re}\lambda_i<0$，则微分方程$\dfrac{du}{dt}=Au$是稳定的且$e^{At}\to 0$；若所有$\mathrm{Re}\lambda_i\leqslant 0$，则它是中性稳定的且$e^{At}$有界；而当至少有一个特征值有$\mathrm{Re}\lambda_i>0$，则它是不稳定的且$e^{At}$无界。

例1

$$\frac{du}{dt}=Au=\begin{bmatrix}0 & -1\\ 1 & 0\end{bmatrix}u, \qquad u_0=\begin{bmatrix}1\\ 0\end{bmatrix}$$

A的特征值满足

$$|A-\lambda I|=\begin{vmatrix}-\lambda & -1\\ 1 & -\lambda\end{vmatrix}=\lambda^2+1=0 \quad 或 \quad \lambda=\pm i$$

它们是纯虚的，所以解应是中性稳定的。事实上，e^{At}是一个旋转矩阵，而且解的每一个分量是一种简谐运动：

$$e^{At}=\begin{bmatrix}\cos t & -\sin t\\ \sin t & \cos t\end{bmatrix} \quad 且 \quad u(t)=e^{At}u_0=\begin{bmatrix}\cos t\\ \sin t\end{bmatrix} \tag{27}$$

此方程描述了一个作圆周运动的点。

例2 扩散方程是稳定的，它的特征值为$\lambda_1=-1$和$\lambda_2=-3$。

例3 前面练习中的连续Markov过程仅是中性稳定的，其$\lambda=0$和$\lambda=-2$。这是一个端点被隔断的扩散方程：没有什么东西离开这个系统，流到无限段去。

例4 在核工程中，一个反应堆当它是中性稳定时，称为是临界的；这时原子裂变与衰减处于平衡状态。较慢的裂变使它趋于稳定或半临界状态，而且实际上要停下来；若有不稳定的裂变它就变成为一个炸弹。

与差分方程相类似，一个问题可以是稳定的，但在它衰减之前仍允许 $\| u(t) \|$ 可稍微增大一些。我相信这种暂时的增长在实际的应用中是不常见的；衰减通常从 $t=0$ 开始。给出一个内积的导数

$$\frac{d}{dt} x^T y = \left[\frac{dx}{dt}\right]^T y + x^T \left[\frac{dy}{dt}\right] \tag{28}$$

我们可以取 $x=y=u$，从而找到由符号来确定是增长还是衰减的那个量

$$\frac{d}{dt} \| u(t) \|^2 = \left[\frac{du}{dt}\right]^T u + u^T \left[\frac{du}{dt}\right] = u^{-1}(A^T+A)u \tag{29}$$

5K　若对所有非零向量u，$u^T(A^T+A)u<0$，这意味着A^T+A的每个特征值均负，则解在每个时刻都是衰减的。若A^T+A的每个特征值均负，则长度$\| u(t) \|^2$永远是常数，这时没有能量的消散，从而这个系统是保守的。

例 1 是保守的，因为如果一个点在一个圆周上运动，则它的长度$\| u \|$当然是不变的。

为寻求稳定性的一个充分必要条件——换句话说，一个与$\mathrm{Re}\lambda_i<0$ 等价的条件——有两种可能的方法。一个是利用Routh和 Hurwitg的结果，他们在19世纪发现了一系列关于元素a_{ij}的不等式。但我认为对大矩阵这个办法不是很好的；因为计算机大概可以求出特征值而比检验这些不等式更可靠。另一种办法是Lyapunov 发现，并于1897年Hurwitz的工作发表两年之后发表的。这就是求一个加权矩阵W，使得加权长度$\| W_u(t) \|$总是递减的。如果存在这样一个W，则$u'=Au$必定是稳定的；$\| W_u \|$将稳定地递减至零，从而经过n次上下摆动之后u也同样趋于零。Lyapunov方法的实际价值是在非线性的情况，那时方程不能求解，但仍可得出一个递减的$\| W_u(t) \|$——使得不需要知道$u(t)$的公式便可证明稳定性。

练习5.4.6　验证(28)确是内积

$$x^T y = x_1(t)y_1(t) + \cdots + x_n(t)y_n(t)$$

的导数。

练习5.4.7 由 $A=\begin{bmatrix}0 & 4\\ -1 & 0\end{bmatrix}$的特征值来决定$du/dt=Au$的稳定性。

练习5.4.8 由

$$A=\begin{bmatrix}-1 & 3\\ 0 & -1\end{bmatrix} \quad 和 \quad A+A^T=\begin{bmatrix}-2 & 3\\ 3 & -2\end{bmatrix}$$

的特征值来确定$du/dt=Au$的解是否由$t=0$起就立刻减小，以及当$t\to\infty$时它是否一定递减。

练习5.4.9 确定$du/dt=w$，$dw/dt=v$是否稳定？

二阶方程

扩散法则导出一个一阶方程$du/dt=Au$。许多其他的应用，化学上的，生物学上的等等也是如此。但是一个更重要的物理定律则不是这样这就是牛顿定律$F=ma$，加速度a是一个二阶导数，惯性项产生二阶方程（我们必须解二阶方程$\frac{d^2u}{dt^2}=Au$以代替$du/dt=Au$）而目的是解释二阶导数的变化怎样改变解的状态。

若我们保留原来的A

$$\frac{d^2u}{dt^2}=Au=\begin{bmatrix}-2 & 1\\ 1 & -2\end{bmatrix}u \tag{30}$$

这种比较将是很完全的。为了使这个系统开动在$t=0$时必须给出两个初始条件——“位移”$u=u_0$和“速度”$du/dt=u_0'$。为满足这些条件，关于一个n个方程的方程组，将要有$2n$个而不是n个纯指数解。

假定我们用ω代替λ，并写出形如$u=e^{i\omega t}x$的特解。把这个指数函数代入微分方程，它必定满足

$$\frac{d^2}{dt^2}(e^{i\omega t}x)=A(e^{i\omega t}x) \quad 或 \quad -\omega^2x=Ax \tag{31}$$

向量x必定是A的一个特征向量。这与以前是一样的。现在相应的特征值是$-\omega^2$。所以频率ω与衰减率λ是由法则$-\omega^2=\lambda$相联系。

一阶方程的每一个特解$e^{\lambda t}x$导出二阶方程的两个特解$e^{i\omega t}x$。这两个指数是$\omega=\pm\sqrt{\lambda}$，且仅当$\lambda=0$时不成立，因为它只有一个平方根：这时，如果x是特征向量，则两个特解是x和tx。

对于一个真正的扩散矩阵，特征值λ都是负的从而频率ω都是实的：纯扩散转化为纯振动。因子$e^{i\omega t}$产生中性稳定，其解既不增长也不衰减，而且事实上总能量一直保持不变，它保持在系统内部变动。若A有负特征值λ_1，$\lambda_2\cdots$，λ_n且若$\omega_j=\sqrt{-\lambda_j}$，则$d^2u/dt^2=Au$的通解*是

$$u(t)=(c_1e^{i\omega_1t}+d_1e^{-i\omega_1t})x_1+\cdots+(c_ne^{i\omega_nt}+d_ne^{-i\omega_nt})x_n \quad (32)$$

与通常一样，这些常数由初始条件来求出。若把振动指数换为更熟悉的sin和cos此事更容易实现（用一个特殊的公式）：

$$u(t)=(a_1\cos\omega t+b_1\sin\omega t)x_1+\cdots+(a_n\cos\omega t+b_n\sin\omega t)x_n \quad (33)$$

现在初始位移与初始速度很容易区分开来：$t=0$表示$\sin\omega t=0$和$\cos\omega t=1$，只得出

$$u_0=a_1x+\cdots+a_nx_n \quad 或u_0=sa \quad 或a=s^{-1}u_0$$

位移决定a而速度决定b：微分$u(t)$且令$t=0$，b由

$$u_0^1=b_1\omega_1x_1+\cdots+b_n\omega_nx_n$$

来确定，代回(33)中，方程得解。

我们要把这些公式用于上面的例子。它的特征值是$\lambda_1=-1$和$\lambda_2=-3$，所以频率是$\omega_1=1$和$\omega_2=\sqrt{3}$。如果这个系统由静止开始（初始速度u_0^0是零），则$b\sin\omega t$的项不出现。而且若第一个次振动由一个单位位移给出，则$u_0=a_1x_1+a_2x_2$引出

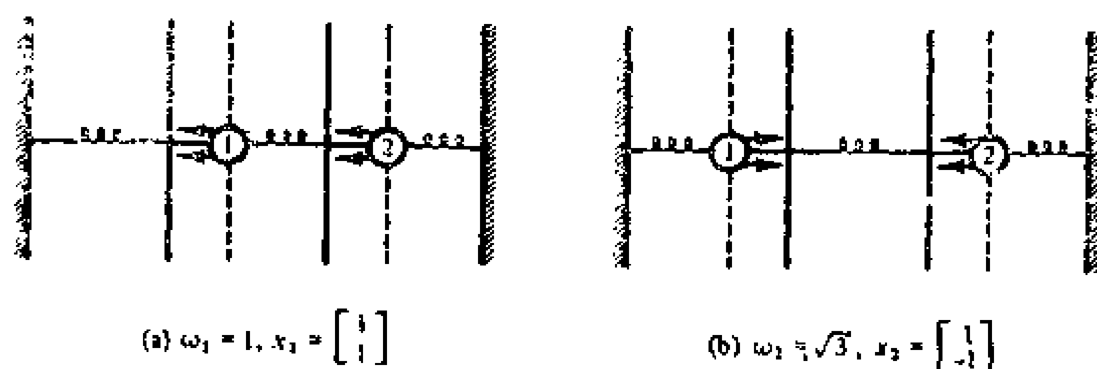
$$\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}=a_1\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}+a_2\begin{bmatrix}1\\-1\end{bmatrix} \quad 或 \quad a_1=a_2=\frac{1}{2}$$

于是其解为

$$u(t)=\frac{1}{2}\cos t\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}+\frac{1}{2}\cos\sqrt{3}\,t\begin{bmatrix}1\\-1\end{bmatrix}$$

* 在横向扭曲问题中四阶导数也可能出现，但是自然界似乎没有超过四阶。

我们从物理上来解释这个解。这个系统表示两个单位质量的质点，用三个相同的弹簧把它们彼此相连并且与静止的墙连接起来（图5.2）第一个质点被推到$v_0=1$，第二个质点固定在适当的位置，而且当$t=0$时我们让其运动。它们的运动$u(t)$成为相应于两个特征值的两个纯振动的平均。在第一种模式中，两个质点连在一起运动而中间的弹簧决没有被拉伸（图5.2a）。频率ω_1与一个质点一个弹簧的情形是一样的它等于1。在较快的模式中$x_2=(1,-1)$，它具有反号的分量及频率$\sqrt{3}$，两个质点反向运动但速度相等（图5.2b）。通解是这两种标准模式的一个组合而我们的特例是每个各占一半。



(a) $\omega_1=1,\ x_1=\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}$　　(b) $\omega_2=\sqrt{3},\ x_2=\begin{bmatrix}1\\-1\end{bmatrix}$

图 5.2　振动的两个标准模式

随时间的持续，这个运动呈现出“概周期”状态。如果比值ω_1/ω_2是一个分数，两个质点将同时回到$v=1$，$\omega=0$，然后全过程重新开始。$\sin 2t$和$\sin 3t$的组合有周期2π，但是因为$\sqrt{3}$是无理数，我们所能要求的最好的状态是这些质点将任意地接近再现初始状态。如果待足够长的时间，它们也可以接近相反的状态$v=0$和$\omega=1$。就像一个非常光滑的台子上的一个永远来回反弹的台球一样，这些质点的总能量是固定的，但它们迟早要以这个能量任意接近任何的状态而出现。

我们在描述了与它平行的连续情况后，再结束这个问题：代替两个质点或几个质点，假定它们是连续的。因为离散的质点和弹簧

合并成一个固体的小棒，由矩阵系数 1，－2，1 给定的"二阶差分"转化为二阶导数。这个极限状态将用有名的波动方程 $\partial^2 u/\partial t^2 = \partial^2 u/\partial x^2$ 来描述。

练习5.4.10 用5.1中的对角化来解

$$\frac{d^2u}{dt^2}=\begin{pmatrix}-1 & 1 & 0\\ 1 & -2 & 0\\ 0 & 1 & -1\end{pmatrix}u \quad u_0=\begin{pmatrix}2\\ -2\\ 0\end{pmatrix} \text{ 和 } u_0'=\begin{pmatrix}1\\ 1\\ 1\end{pmatrix}。$$

练习5.4.11 解

$$\frac{d^2u}{dt^2}=\begin{bmatrix}-5 & -1\\ -1 & -5\end{bmatrix}u \quad u_0=\begin{bmatrix}1\\ 0\end{bmatrix} \text{ 和 } u_0'=\begin{bmatrix}0\\ 0\end{bmatrix}。$$

练习5.4.12 给定一个阻力矩阵 F，两个单位质点依 $d^2u/dt^2 = -Fdu/dt+Au$ 来振动。把一个纯指数 $e^{\rho t}x$ 代入这个方程并建立一个关于 ρ 的二次特征值问题。

练习5.4.13 方程 $u''=Au$ 的解仍是 A 的特征向量的一个组合，A 的特征向量组成 S 的列向量组。代替在 $u'=Au$ 中出现的 $u=Se^{\Lambda t}S^{-1}u_0$，验证下列解

$$u(t)=S\begin{pmatrix}\cos\omega_1 t & & \\ & \ddots & \\ & & \cos\omega_n t\end{pmatrix}S^{-1}u_0$$

$$+S\begin{pmatrix}(\sin\omega_1 t)/\omega_1 & & \\ & \ddots & \\ & & (\sin\omega_n t)/\omega_n\end{pmatrix}S^{-1}u_0'$$

满足微分方程和所给初始条件。

练习5.4.14 对课文中的例子，如果第一个质点在 $t=0$ 时满足 $u_0=\begin{bmatrix}0\\ 0\end{bmatrix}$ 和 $u_0'=\begin{bmatrix}1\\ 0\end{bmatrix}$，求第二个质点的运动。

§5.5 复的情况：Hermite矩阵和酉矩阵

仅仅用实向量和实矩阵是干不了多少事情的。在本书的前半部分，当基本问题是$Ax=b$时，只要A，b是实的，x当然也还是实的。因此那时并不需要复数：复数也可以使用，但不会得出什么新的东西。现在我们就不能回避它们了。一个实矩阵它的特征多项式具有实系数，但是它的特征值可以不是实的（如$\lambda^2+1=0$）。

于是我们将介绍有n个复分量的向量空间C^n。加法与矩阵乘法将服从与原先相同的法则。但向量长度的定义必须改变，不然具有分量（1，i）的向量的长度将为0：$1^2+i^2=0$。长度计算的改变带来了其它一系列的改变。两个向量的内积，一个矩阵的转置，对称矩阵，斜对称矩阵，正交矩阵定义等在复数情形中都要改变。而每一种情形中，当向量和矩阵是实的时，新旧定义将是一致的。

我们在第255页列举了所有的改变，这些列举实际上汇总成实与复两种情形转换的一部字典。我们希望它将有助于读者。对每一类矩阵，它也包含了它的特征值分布的最佳信息。我们特别要指出对于对称矩阵，它的特征值在哪里及它的特征向量有什么特性等，从应用角度来看，这是特征值理论中最重要的问题，于是这也是最重要的一节。

复数和它的共轭

读者大概已经熟知复数了，因为只需要最重要的基本性质，所以很容易给出一个简短的介绍*。每个读者都知道i是什么，它满足方程$i^2=-1$。它是一个纯虚数，而且若b是实数，则它的倍数ib也是纯虚的。一个实数和一个虚数的和是一个复数$a+ib$；而且把它自然而然地画在复平面上（图5.3）

实数（对复数中$b=0$）和虚数（$a=0$）作为复数的特殊情

* 最重要的想法是复共轭和模。

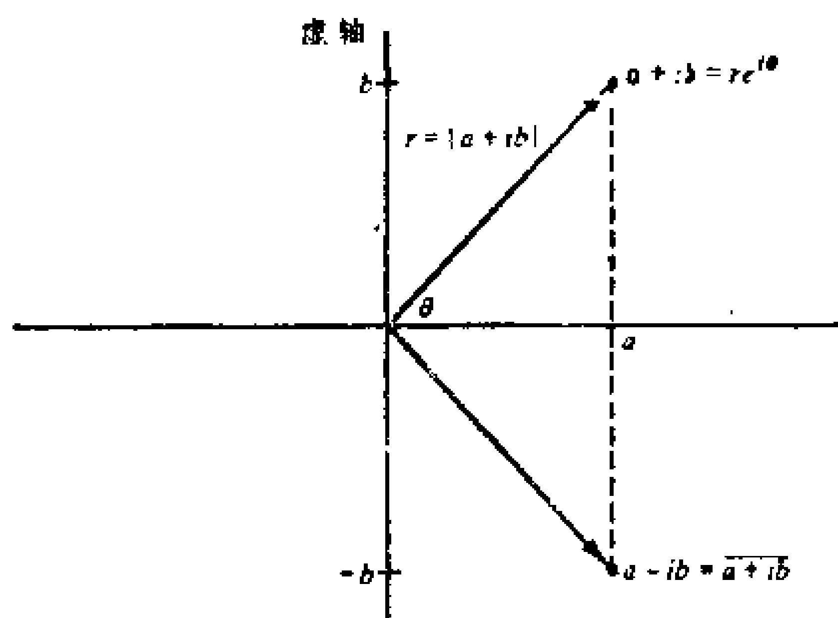


图 5.3 复平面

况被包含在内。它们分别位于两个坐标轴上。两个复数相加依下述法则

$$(a+ib)+(c+id)=(a+c)+i(b+d)$$

而乘法利用法则$i^2=-1$：

$$(a+ib)(c+id)=ac+ibc+iad+i^2bd=(ac-db)+i(bc+ad)$$

$a+ib$的复共轭是数$a-ib$，也就是虚部变号。从几何上看，它是在实轴另一侧的镜象：任何实数是自共轭的。共轭用加一横来表示，$\overline{a+ib}=a-ib$，而且它有三个性质：

（1） 乘积的共轭等于共轭的乘积：

$$\overline{(a+ib)(c+id)}=(ac-bd)-i(bc+ad)=\overline{(a+ib)}\ \overline{(c+id)} \tag{34}$$

（2） 和的共轭等于共轭的和：

$$\overline{(a+c)+i(b+d)}=(a+c)-i(b+d)=\overline{(a+ib)}+\overline{(c+id)}$$

（3） 任何复数$a+ib$乘以它的共轭数$a-ib$得一个实数，它是图5.3中斜边的平方：

$$(a+ib)(a-ib)=a^2+b^2=r^2 \tag{35}$$

这个距离 r 叫做向量 $a+ib$ 的模，而且（如一个实数的绝对值一样，它不会是负的）它用竖线来表示：$|a+ib|=r=\sqrt{a^2+b^2}$
最后，三角学把其它两边与斜边如下式联系起来：

$$a=\sqrt{a^2+b^2}\cos\theta, \qquad b=\sqrt{a^2+b^2}\sin\theta$$

把这两个方程组合起来，我们得到极坐标形式：

$$a+ib=\sqrt{a^2+b^2}(\cos\theta+i\sin\theta)=re^{i\theta} \tag{36}$$

有一种重要的特殊情况：当模 r 等于1时，这时复数就是 $e^{i\theta}=\cos\theta+i\sin\theta$，而且它位于复平面的单位圆上。当 θ 由0变到 2π 时，这个数 $\theta^{i\theta}$ 围绕原点以固定的半径 $|e^{i\theta}|=\sqrt{\cos^2\theta+\sin^2\theta}=1$ 转一周。

练习5.5.1 对复数 $3+4i$ 与 $1-i$。

(a)找出它们在复平面上的位置。

(b)求出它们的和与积。

(c)求它们的共轭数与模。

它们在单位圆的外部还是内部？

练习5.5.2 请你回答下列问题

(i)一个复数与它的共轭数之和是什么？

(ii)一个在单位圆上的数的共轭是什么？

(iii)单位圆上两个数的乘积是什么？

(iv)单位圆上两个数之和是什么？

练习5.5.3 验证两个复数之积的模等于它们模的积：

$$|(a+ib)(c+id)|=|a+ib|\cdot|c+id|$$

或 $$|(re^{i\theta})(Re^{i\phi})|=rR$$

在复的情况中的长度和转置

我们回到线性代数来并从事由实到复的转换。这第一步是承认复向量，这是不成问题的：按定义，空间 C^n 包含了所有具有 n 个复分量的向量 x：

$$x=\begin{pmatrix}x_1\\ \vdots\\ x_n\end{pmatrix}, \qquad x_j=a_j+ib_j$$

向量x和y相加时分量对应相加，但数乘时要用复数去乘。同以前一样，向量$v_1\cdots$，v_k是线性相关的，如果某个非平凡的组合$c_1v_1+\cdots c_kv_k$得出零向量的话，其中c_j现在可以是复数。单位坐标向量仍在C^n中；它们仍是无关的；而且仍构成一组基。于是C^n也是一个n维向量空间。

我们已经强调指出长度定义必须改变；因为一个复数的平方不一定是正的，从而$\|x\|^2=x_1^2+\cdots+x_n^2$不能使用。新的定义完全是自然的：$x_j^2$被它的模$|x_j|^2$代替，从而长度满足

$$\|x\|^2=|x_1|^2+\cdots+|x_n|^2 \tag{37}$$

在二维情形中，

$$x=\begin{bmatrix}1\\i\end{bmatrix} \quad 且 \quad \|x\|^2=2$$

$$y=\begin{bmatrix}2+i\\2-4i\end{bmatrix} \quad 且 \quad \|y\|^2=25$$

对于实向量，在长度与内积之间存在着密切联系：$\|x\|^2=x^Tx$。这种联系我们希望能保存下来。于是内积必须修改以适应长度的新定义，而标准的修改是在内积中第一个向量取共轭。这意味着x被$\overline{x}$代替，x与y的内积变成

$$\overline{x}^Ty=\overline{x}_1y_1+\cdots+\overline{x}_ny_n$$

C^2中一个典型的例子是

$$x=\begin{bmatrix}1+i\\3i\end{bmatrix}, \qquad y=\begin{bmatrix}4\\2-i\end{bmatrix}$$

$$\overline{x}^Ty=(1-i)4+(-3i)(2-i)=1-10i$$

从而如果我们取x为其自身的内积，我们重新得出长度的平方：

$$\overline{x}^Tx=\overline{(1+i)}(1+i)+\overline{(3i)}(3i)=2+9=\|x\|^2$$

注意$\overline{y}^Tx$与$\overline{x}^Ty$不同；从现在起，我们注意内积中向量的顺序，而且还有进一步的新奇现象：若x换为cx，则x，y的内积不是用c去乘，而是用$\overline{c}$去乘。

还剩下一个改变要去做。这个改变在概念上没有任何其他的东

西，而是把两个符号合并为一：代替关于共轭的一横和关于转置的 T，这两种运算合并成**共轭转置**，而且用大写的 H 来表示。于是 $\overline{x}^T = x^H$，而且同一个符号也用在矩阵上：A 的共轭转置是

$$\overline{A}^T = A^H \quad \text{它的元素}(A^H)_{ij} = \overline{A}_{ji} \tag{39}$$

若 A 是 $m \times n$ 的，则 A^H 是 $n \times m$ 的。例如

$$\begin{bmatrix} 2+i & 3i \\ 4-i & 5 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}^H = \begin{bmatrix} 2-i & 4+i & 0 \\ -3i & 5 & 0 \end{bmatrix}$$

这个符号 A^H 给出下面确认的事实：对复元素的矩阵来说，我们难得只要求 A 的转置。在每个实际情况中，它是共轭转置或**Hermite(埃尔米特)转置**，变得更为适当*。复数所要求的修改很容易总结如下：

5L (i) x 和 y 的内积是 $x^H y$，如果 $x^H y = 0$ 它们是正交的。

(ii) x 的长度是 $\|x\| = (x^H x)^{\frac{1}{2}}$

(iii)法则 $(AB)^T = B^T A^T$ 在每个元素取共轭后，变成 $(AB)^H = B^H A^H$。

练习5.5.4 求 $x = \begin{bmatrix} 2-4i \\ 4i \end{bmatrix}$ 和 $y = \begin{bmatrix} 2+4i \\ 4 \end{bmatrix}$ 的内积和每个向量的长度。

练习5.5.5 若 $A = \begin{bmatrix} 1 & i & 0 \\ i & 0 & 1 \end{bmatrix}$ 写出矩阵 A^H 并计算 $C = A^H A$。C 与 C^H 有什么关系？当 C 是由某个 $A^H A$ 构造出来时，这种关系是否仍保持？

练习5.5.6 (i)对上述的 A，用消去法解 $Ax = 0$。

(ii)证明刚刚算出的核与 $\mathscr{R}(A^H)$ 正交而与通常的行空间 $R(A^T)$ 不正交。在复的情形中，四个基本空间是 $\mathscr{N}(A)$，$\mathscr{R}(A)$ 以及 $\mathscr{N}(A^H)$ 和 $\mathscr{R}(A^H)$。

Hermite矩阵

在前几章我们讨论了对称矩阵：$A = A^T$。现在面对复矩阵，对

* 矩阵 A^H 常称"AHermite"。遗憾的是不得不注意这个叫法与术语"A 是Hermite矩阵"之间的区别，后者意味着"A 等于 A^H"。

称的想法必须被扩充。正确的推广不是与它的转置相等的矩阵，而是**与它的共轭转置相等的矩阵**。它们是Hermite矩阵，一个典型的例子是

$$A=\begin{bmatrix}2 & 3-3i\\ 3+3i & 5\end{bmatrix}=A^H \tag{40}$$

注意：对角线元素一定是实的；因为它们在取共轭的过程中不能改变。对角线上方的每个元素与它关于主对角线的镜像相配对，这两个元素是相互复共轭的。在每一情形中都有$a_{ij}=\overline{a}_{ji}$。而且这个例子将非常清楚地解释埃尔米特矩阵的四个基本性质。

我们主要的目的是建立这四个性质，而且特别要再次强调指出：它们同样适用于实对称矩阵，而后者是埃尔米特矩阵的一种特殊而又最重要的情况。

性质 1 若$A=A^H$，则对所有复向量x，x^HAx是实的。

$$x^HAx=(\overline{u}\quad\overline{v})\begin{bmatrix}2 & 3-i\\ 3+3i & 5\end{bmatrix}\begin{bmatrix}u\\ v\end{bmatrix}$$

$$=2\overline{u}u+5\overline{v}v+(3-3i)\overline{u}v+(3+3i)u\overline{v}$$

每个"对角线项"是实的，因为$2\overline{u}u=2|u|^2$而且$5\overline{v}v=5|v|^2$。对角线上方的元素与另一个是共轭，所以它们加起来得到$(3-3i)\overline{u}v$的实部的两倍。于是x^HAx的整个表达式是实的。

为给出一个一般性的证明，我们可以计算$(x^HAx)^H$。我们应对1×1矩阵x^HAx取共轭，但我们实际上重新得到同一个数：$(x^HAx)^H=x^HA^Hx^{HH}=x^HAx$。所以此数一定是实的。

性质 2 一个埃尔米特矩阵的每个特征值都是实的。

证 设λ是一个特征值，且x是一个相应的非零特征向量：$Ax=\lambda x$。用x^H乘等式两边：$x^HAx=\lambda x^Hx$，等式左边由性质 1 可知是实的，而右边$x^Hx=\|x\|^2$是实的且是正的，因为$x\neq0$，于是λ一定是实的。在我们的例子中

$$|A-\lambda I|=\begin{vmatrix}2-\lambda & 3-3i\\ 3+3i & 5-\lambda\end{vmatrix}=\lambda^2-7\lambda+10-|3-3i|^2$$

$$=\lambda^2-7\lambda-8=(\lambda-8)(\lambda+1) \tag{41}$$

性质3 Hermite矩阵的特征向量，若它们对应不同的特征值，则它们彼此是正交的。

由已给条件，$Ax=\lambda x$且$Ay=\mu y$，$\lambda\neq\mu$。$Ax=\lambda x$的Hermite转置是$x^HA^H=\overline{\lambda}x^H$，但因为$A=A^H$，由性质2，$\lambda$是实的，所以它实际上是$x^HA=\lambda x^H$，对此方程右乘$y$，对另一方程左乘$x^H$，我们得出 $x^HAy=\lambda x^Hy$和$x^HAy=\mu x^Hy$

于是$\lambda x^Hy=\mu x^Hy$，因为$\lambda\neq\mu$，我们断言$x^Hy=0$；x与y正交。在我们的例子中，$Ax=8x$且$Ay=-y$。

特征向量可用通常的方法如下计算

$$(A-8I)x=\begin{bmatrix}-6 & 3-3i\\ 3+3i & -3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\ 0\end{bmatrix}\qquad x=\begin{bmatrix}1\\ 1+i\end{bmatrix}$$

$$(A+I)y=\begin{bmatrix}3 & 3-3i\\ 3+3i & 6\end{bmatrix}\begin{bmatrix}y_1\\ y_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\ 0\end{bmatrix}\quad y=\begin{bmatrix}1-i\\ -1\end{bmatrix}$$

这两个特征向量是正交的：

$$x^Hy=[1\quad 1-i]\begin{bmatrix}1-i\\ -1\end{bmatrix}=0$$

当然任何倍式x/α和y/β也同样是特征向量，设我们取$\alpha=\|x\|$和$\beta=\|y\|$，使得x/α和y/β是单位向量；这时特征向量被单位化。因为它们已是正交的了，所以它们现在是标准正交的。如果选取它们作为S的列向量组，则我们有$S^{-1}AS=\Lambda$。对角化矩阵S有正交单位列向量组。若原来的A是实对称的，则它的特征值和特征向量是实的；于是单位化这些特征向量使S成为一个正交矩阵。一个实对称矩阵可以用一个正交矩阵Q对角化。

在复的情形中，对具有单位正交列向量组的矩阵我们需要一个新的名称和新的符号：它叫做酉矩阵，记为U。实正交矩阵满足$Q^TQ=I$及$Q^T=Q^{-1}$。与此类似，标准正交列向量的性质转为

$$U^H U = \begin{pmatrix} — \bar{x}_1 — \\ — \bar{x}_2 — \\ \cdots \\ — \bar{x}_n — \end{pmatrix} \begin{pmatrix} | & | & & | \\ x_1 & x_2 & \cdots & x_n \\ | & | & & | \end{pmatrix} = I$$

或 $$U^H = U^{-1} \tag{42}$$

它引出埃尔米特矩阵最后一个特殊性质

性质4 若$A=A^H$，则存在一个对角化矩阵，它本身是酉矩阵，$S=U$：它的列向量组是标准正交的，而且

$$U^{-1}AU = U^H AU = \Lambda \tag{43}$$

于是埃尔米特矩阵可被分解为

$$A = U\Lambda U^H = \lambda_1 x_1 x_1^H + \lambda_2 x_2 x_2^H + \cdots + \lambda_n x_n x_n^H \tag{44}$$

这个分解叫做**谱定理**。它把A表为一维射影$x_i x_i^H$的一个组合，它们与第三章中的射影aa^T是类似的。它们把任何向量b分解成它在单位特征向量方向上的分量$p=x_i(x_i^H b)$。这些单位特征向量是一组两两互相垂直的轴。这些单独的射影p被赋以权λ_i，再重新组合成

$$Ab = \lambda_1 x_1 (x_1^H b) + \cdots + \lambda_n x_n (x_n^H b) \tag{45}$$

若每个$\lambda_i=1$，我们重新组成b本身；$A=UIU^H$是单位矩阵。在任何一种情形中我们均可用矩阵乘法直接验证(44)和(45)：

$$Ab = U\Lambda U^H b = \begin{pmatrix} | & & | \\ x_1 & \cdots & x_n \\ | & & | \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} — \bar{x}_1 — \\ \vdots \\ — \bar{x}_n — \end{pmatrix} [\, b \,]$$

$$= \begin{pmatrix} | & & | \\ x_1 & \cdots & x_n \\ | & & | \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 x_1^H b \\ \vdots \\ \lambda_n x_n^H b \end{pmatrix}$$

$$= \lambda_1 x_1 x_1^H b + \cdots + \lambda_n x_n x_n^H b$$

在我们的例子中，两个特征向量$x=\begin{bmatrix}1\\1+i\end{bmatrix}$和$y=\begin{bmatrix}1-i\\-1\end{bmatrix}$的长度都是$\sqrt{3}$，单位化后得出一个使$A$对角化的酉矩阵：

$$U=\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{bmatrix}1 & 1-i\\1+i & -1\end{bmatrix}\qquad U^{-1}AU=\begin{bmatrix}8 & 0\\0 & -1\end{bmatrix}$$

于是谱分解$V\Lambda V^H=\lambda_1x_1x_1^H+\lambda_2x_2x_2^H$成为

$$\frac{8}{3}\begin{bmatrix}1\\1+i\end{bmatrix}(1\quad 1-i)-\frac{1}{3}\begin{bmatrix}1-i\\-1\end{bmatrix}(1+i\quad -1)$$

$$=\begin{bmatrix}2 & 3-3i\\3+3i & 5\end{bmatrix}=A$$

练习5.5.7　写出一个非Hermite矩阵，甚至是实的，并求一个x，使x^HAx不是实的（只有Hermite矩阵有性质1）。

练习5.5.8　求$A=\begin{bmatrix}0 & i\\-i & 0\end{bmatrix}$的特征值和单位特征向量。计算矩阵$\lambda_1x_1x_1^H$和$\lambda_2x_2x_2^H$，并验证它们的和为$A$且它们的积为0(为什么$(\lambda_1x_1x_1^H)(\lambda_2x_2x_2^H)=0$？)

练习5.5.9　用5.1中算出的特征值和特征向量，对矩阵

$$A=\begin{pmatrix}1 & -1 & 0\\-1 & 2 & -1\\0 & -1 & 1\end{pmatrix}$$

求使A对角化的酉矩阵及A的谱分解。

练习5.5.10　证明任何Hermite矩阵的行列式是实的。

对谱定理及性质4的其余内容仅当A的特征值是两两不同时给出了证明（这时它们当然有几个无关的特征向量而且A肯定可对角化）。但是下列事实也是正确的（见5.6节）：既使有重的特征值，一个Hermite矩阵仍有一个完备的单位正交特征向量组。于是在任何情况下A均可由酉矩阵U对角化。

把实特征值与正交特征向量组合起来的只能是Hermite矩阵。

如果$U^{-1}AU$是一个实对角阵Λ，且U是酉矩阵，则A必定是Hermite的：

$$A^H=(U\Lambda U^{-1})^H=U\Lambda U^H=A$$

对任何数学家来说，这个分解$A=U\Lambda U^H$看去是绝对不会改变的；它是基本的，但没有人认为它是可争论的。所幸的是，心理学家不同意这一点，或者说彼此不同意。他们设法对谱定理做了很多争论，我们将试图作一简短的解释。**但是这一小节可以省略而完全不影响内容的连贯性。**

因子分析和主成分分析

本小节的目的是在一组试验数据——例如：一组关于物理、数学，历史和英语的考试成绩——中找出某种规律或某种自然的结构。这个一般的领域叫做多元分析，在它的子领域中，有些是为了外部的目的来组织试验结果的，如预言数据之外的某些事实，而其余的则完全专注于它的内部结构。

（1）回归分析是预言问题的典型例子*：我们可以猜出每个学生的智商，并问这些考试成绩能否用来预言智商（或以后用来预言）换句话说，我们要找出这四个考试成绩的一个线性组合使其等于智商。在这个组合中有四个未知系数，而对每个学生有一个方程。这是一个典型的最小二乘问题，其方程多于未知数，而且它不涉及特征值。

（2）对内部结构，假定数据被简缩写成一个4×4相关矩阵R。它的对角线元素是1（每个变元x_i与它本身完全相关），而对角线上方元素r_{ij}给出第i次和第j次试验结果之间的相关性，例如物理与数学之间的相关性。则一类分析，它被称为主成份分析，用于寻找这四种考试的一些组合，它们之间是不相关的。用线性代数的语言来说，我们要去找出相互正交的一组向量。对此，实对称矩阵R

* 我们的例子可以说是一种倒退，因为用智商来预言其它的事情是更正规的。但是这种预言的可逆性，这几乎是一种过去和将来的可逆性，有某种意义。

的谱分解则是一个很好的工具：若特征向量是q_1，$\cdots q_4$，则它们组合成一个正交矩阵Q，使R对角化：$Q^{-1}RQ=\Lambda$或

$$R=Q\Lambda Q^T=(q_1\cdots q_4)\begin{pmatrix}\lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_4\end{pmatrix}\begin{pmatrix}q_1^T\\ \vdots \\ q_4^T\end{pmatrix}$$

$$=(\sqrt{\lambda_1}q_1\cdots\sqrt{\lambda_4}q_4)\begin{pmatrix}\sqrt{\lambda_1}q_1^T\\ \vdots \\ \sqrt{\lambda_1}q_4^T\end{pmatrix}.$$

其中Q正是我们的酉矩阵。在实际应用中它是实的。每个向量$\sqrt{\lambda_i}\,q_i$给出这个四个考试的一种组合，而这四个特殊的组合是不相关的。到此，就没什么可争议的了。

（3）我们转到因子分析问题上来。它也是专门从事解释相关矩阵非对角线元素的一种分析。它试图用比较少的因子f_i来做到这一点，而这些f_i仍是原始数据的一个线性组合。但是不能要求它们完全说明对角线元素。如果一种考试的成绩，由于考题太难或太容易，呈现出一种很窄小的分布范围，而另外的考试则有较广的分布范围，那么因子分析就是打算消除这种差别。它涉及正确得出这些相互依赖性，而一个理想的情况是把相关矩阵分解为

$$R=\begin{pmatrix}1 & 0.74 & 0.24 & 0.24\\ 0.74 & 1 & 0.24 & 0.24\\ 0.24 & 0.24 & 1 & 0.74\\ 0.24 & 0.24 & 0.74 & 1\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}0.7 & 0.5\\ 0.7 & 0.5\\ 0.7 & -0.5\\ 0.7 & -0.5\end{pmatrix}\begin{bmatrix}0.7 & 0.7 & 0.7 & 0.7\\ 0.5 & 0.5 & -0.5 & -0.5\end{bmatrix}+0.26I$$

在这种情形中，两个因子说明所有的相关性。第一个是等于0.7的一列；它被解释为一般智力因子：数学的好分数和英语的好分数可同时取得。而第二个因子则由数学、物理及英语、历史这两组较弱的相关性中，区分出数学与物理以及英语与历史之间的很强的相关性。这是一种"文理对比"的因子。它们是用来解释数据的适当的变量，而且它的分量0.7，0.5和－0.5是这些因子在单个考试上的负载。在全部四次考试中，这些因子说明在主对角线上的个体方差的0.74，它是"公因子方差"，即在分解$R=FF^T+D$中FF^T的对角线元素。

争论来自两方面的原因。首先，因子矩阵F和对角矩阵D不是唯一的。我们可把同一个R分解为

$$R=\begin{pmatrix} 0.6 & \sqrt{0.38} & 0 \\ 0.6 & \sqrt{0.38} & 0 \\ 0.4 & 0 & \sqrt{0.58} \\ 0.4 & 0 & \sqrt{0.58} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0.6 & 0.6 & 0.4 & 0.4 \\ \sqrt{0.38} & \sqrt{0.38} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{0.58} & \sqrt{0.58} \end{pmatrix}+D$$

在这里，我们改变了因子的个数，而这些因子没有一个是先前知道的。事实上，公因子方差同样是未知的，所以我们可以改变D，并造出无数个完全不同的分解。因此对一般智力赋予多大的权以及怎样把数理能力与文学能力区分开来则完全是不清楚的。

引起争论的另一个原因是，即使D已给出，其p个因子也已找出，还有一个"旋转因子"的可能性。对任何p阶正交矩阵Q，因子矩阵$\widetilde{F}=FQ$正好说明与F相同的相关性$\widetilde{F}\widetilde{F}^T=FQQ^TF^T=FF^T$。

于是 F 和 $\widetilde{F}$ 完全是可以互换的。在一个典型的问题中，原来的因子可以在许许多多的变元上有实在的负载，而这样一个因子实际上是不可能被解释的。它作为一个向量f_i有数学意义，但对社会科学家是没有实用的意义。于是他试图选择一个旋转，用它可造出一个简单的结构，它在少数的分量有大负载而在其它分量中负载极小，甚至为了得到一个正负载而使用斜交的因子；在我们关于R的第二个分解中，正交性$f_i^T f_j=0$已不再保持。这样一来，两个专家，每个人都估计一组D，p和Q，可能很容易地对相同的数据产生完全不同的解释。虽然如此，这种技巧仍是非常需要的，既使多元分析在开始时被认为是一个不受欢迎的讨嫌鬼，但是它在从心理学到生物学，经济学和社会科学这样一个很广的范围内都有应用。

练习5.5.11 对同一个R求另一个分解FF^T+D它有什么意义没有？

酉矩阵和斜Hermite矩阵

我们可否提出一种类比？一个Hermite矩阵可比做一个实数，斜Hermite矩阵比做一个纯虚数，而酉矩阵则看成是单位圆上的数，也就是模1复数$e^{i\theta}$。对这些矩阵的特征值，上述比较则是一个更好的类比：若$A^H=A$，λ本身是实的，若$K^H=-K$，则是纯虚的，而当$U^H=U^{-1}$时它们在单位圆上。对于所有这样矩阵，它们的特征向量是正交的，而且可造成单位正交的*。

因为Hermite矩阵的性质已给出了，余下的只要讨论K和U。我们要找出类似于这四个性质的东西，而斜Hermite矩阵K与Hermite矩阵的联系是如此密切以至不需要再做什么了：

5M 若K是一个斜Hermite，使得$K^H=-K$则矩阵 $A=iK$ 是Hermite的：

$$A^H=(i)^H(K)^H=(-i)(-K)=A$$

* 在下一节中，我们把更广的一类矩阵与所有复数的集合对应起来。一个没有正交特征向量的矩阵不属于其中的任何一类，从而在这个类比之外。

类似地，若A是Hermite，则$K=iA$是斜Hermite的。

前几页中的Hermite矩阵的例子引出

$$K=iA=\begin{bmatrix} 2i & 3+3i \\ -3+3i & 5i \end{bmatrix}=-K^H$$

它的对角线元素总是 i 的倍数（可以是零）。

K与A之间的这种简单的联系使性质1—4转换成下列性质：

(1′)对任何x，x^HKx是纯虚数

(2′)K的每个特征值是纯虚的。

(3′)相应于不同特征值的特征向量是正交的。

(4′)存在一个酉矩阵，使得$U^{-1}KU=\Lambda$。

练习5.5.12 若K是斜Hermite的，你如何知道$K-I$是非奇异的？

练习5.5.13 造一个任意的实矩阵K和实向量x，验证$x^HKx=0$。解释怎样由性质1′来得出这个性质。

练习5.5.14 每个矩阵Z可分解成一个Hermite矩阵和一个斜Hermite征矩阵之和，$Z=A+K$，正如一个复数x分解为$a+ib$一样。z的实部是$z+\bar{z}$的一半，而Z的“实部”是$Z+Z^H$的一半，对“虚部”K找出类似公式，并将

$$Z=\begin{bmatrix} 3+i & 4+2i \\ 0 & 5 \end{bmatrix}$$

分解为$A+K$。

现在我们转向酉矩阵。它们已定义为具有单位正交列向量的方阵：

$$U^HU=I或UU^H=I或U^H=U^{-1} \tag{46}$$

这直接导出这些性质中的第一个：用U去乘不改变内积，角度及长度，这是我们已知的正交矩阵的一个性质。现在我们转到复的情况，而证明和实的情形一样。

性质1″ $(Ux)^H(Uy)=x^HU^HUy=x^Hy$且$\|Ux\|^2=\|x\|^2$*

* 当内积不变时长度就不变，只要取$y=x$即可。

与2和2′类似，下一个性质给出U的特征值所在的位置。

性质 2″ U的每个特征值有模$|\lambda|=1$

这直接由$Ux=\lambda x$通过比较两边的长度而得出：由1″ $\|Ux\|=\|x\|$且$\|\lambda x\|=|\lambda|\ \|x\|$，于是$|\lambda|=1$

性质 3″ 相应于不同特征值的特征向量是正交的。

性质的证明由$Ux=\lambda x$，$Uy=\sigma y$入手，它们的内积是

$$(Ux)^H(Uy)=(\lambda x)^H\sigma y \quad 或 x^H y=(\bar{\lambda}\sigma)x^H y$$

若σ等于λ，我们将有$\bar{\lambda}\sigma=\bar{\lambda}\lambda=|\lambda|^2=1$。但因为$\sigma$不等于$\lambda$，我们知道$\bar{\lambda}\sigma\neq 1$——从而只能是$x^H y=0$。

把这些特征向量单位化，用它们组成S的列向量，这个对角化矩阵成为一个酉矩阵——不要与被对角化的U相混淆！

性质 4″ 若U是一个酉矩阵，它有一个对角化矩阵S，其本身也是酉的：$S^{-1}US=S^HUS=\Lambda$

所有四个性质都可以用旋转矩阵

$$U(t)=\begin{bmatrix}\cos t & -\sin t\\ \sin t & \cos t\end{bmatrix}$$

来解释。它们的特征值是e^{it}和e^{-it}，它们都是模1的。特征向量是$\begin{bmatrix}1\\ -i\end{bmatrix}$和$\begin{bmatrix}1\\ i\end{bmatrix}$。它们是正交的，单位化之后它们并成一个酉矩阵$S$：

$$U=S\Lambda S^{-1}=\begin{bmatrix}1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2}\\ -i/\sqrt{2} & i/\sqrt{2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}e^{it} & \\ & e^{-it}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1/\sqrt{2} & i/\sqrt{2}\\ 1/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2}\end{bmatrix}$$

旋转当然保持长度不变，$\|Ux\|=\|x\|$，而且第234页上的例子与这个特殊的U作为一个斜Hermite矩阵的指数函数是相同的。

$$若\quad K=\begin{bmatrix}0 & -1\\ 1 & 0\end{bmatrix}\qquad 则\quad e^{Kt}=\begin{bmatrix}\cos t & -\sin t\\ \sin t & \cos t\end{bmatrix}$$

现在我们希望把每个K与一个U联系起来：

5N 若K是一个斜Hermite矩阵，则e^{Kt}是一个酉矩阵。于是du

$/dt=Ku$的解与它的始值u_0有相同的长度：

$$\| u(t) \| = \| e^{Kt}u_0 \| = \| u_0 \|。$$

最简单的证明是先将K对角化：对某个酉矩阵S和纯虚矩阵Λ，$K=S\Lambda S^{-1}$，则$e^{\Lambda t}$是一个具有对角元素$e^{\lambda_1 t}$，…，$e^{\lambda_n t}$的对角矩阵，它们的模均为1。这样一个矩阵是酉矩阵，于是$e^{Kt}=Se^{\Lambda t}S^{-1}$是三个酉矩阵的乘积，由下列的练习可知，其积本身也是酉的。

练习5.5.15 证明若U和V是酉的，则UV也是酉的。

练习5.5.16 证明一个酉矩阵的行列式是模为1的，$|\det U|=1$，但行列式不一定等于1。给出所有的2×2对角酉矩阵。

练习5.5.17 求第三个列向量使得

$$U=\begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} & 1/\sqrt{2} & \\ 1/\sqrt{3} & 0 & \\ 1/\sqrt{3} & 1/\sqrt{2} & \end{pmatrix}$$

是酉的。这个选择有多大的自由度？

练习5.5.18 将$K=\begin{bmatrix} i & i \\ i & i \end{bmatrix}$对角化。计算$e^{Kt}=Se^{\Lambda t}S^{-1}$并验证这个指数函数是酉的。它在$t=0$时的导数是什么？

练习5.5.19 描述所有3×3的同时是Hermite和酉的对角矩阵。这样的矩阵有多少？

实与复的对比

R^n=具有n个实分向量空间⟷C^n=具有n个复分量的向量空间

长度：$\| x \|^2=x_1^2+\cdots+x_n^2$⟷

长度：$\| x \|^2=|x_1|^2+\cdots+|x_n|^2$

转置：$A^T_{ij}=A_{ji}$⟷Hermite转置：$A^H_{ij}=\overline{A_{ji}}$

$$(AB)^T=B^TA^T \longleftrightarrow (AB)^H=B^HA^H$$

内积：$x^Ty=x_1y_1+\cdots+x_ny_n$ ←→ 内积：$x^Hy=\overline{x}_1y_1+\cdots$
$+\overline{x}_ny_n$

$$(Ax)^Ty=x^T(A^Ty) \longleftrightarrow (Ax)^Hy=x^H(A^Hy)$$

正交性：$x^Ty=0$ ←→ 正交性：$x^Hy=0$

对称阵：$A^T=A$ ←→ Hermite矩阵：$A^H=A$

x^HAx是实的，每个特征值是实的，而且

$$A=U\Lambda U^{-1}=U\Lambda U^H。$$

斜对称阵，$K^T=-K$ ←→ 斜Hermite矩阵：$K^H=-K$

x^HAx是虚的，每个特征值是虚的且$K=iA$

正交阵：$Q^TQ=I$或$Q^T=Q^{-1}$ ←→ 酉矩阵：$U^HU=I$或$U^H=U^{-1}$

$(Qx)^T(Qy)=x^Ty$ 且 $\|Qx\|=\|x\|$ ←→ $(Ux)^H(Uy)=x^Hy$且
$\|Ux\|=\|x\|$

它的行，列和特征向量是单位正交的，而且每一个$|\lambda|=1$。

§5.6 相似变换和三角标准形

在这一章中的每一步实际上都涉及一个组合$S^{-1}AS$，A的特征向量位于S的列向量组中。当A是埃尔米将和斜 Hermite 矩阵时，我们用U代替S，它用的特征向量是单位正交的；但它仍是特征向量矩阵。现在，在这最后一节中，我们来考察另一些组合$M^{-1}AM$——与$S^{-1}AS$用相同的方式组成，但是使用任意的非奇异矩阵M，特征向量矩阵可以不存在，或者我们可能不知道它，甚至我们可以不打算使用它。

首先回忆一下，这些组合是怎样引起的是一件有价值的事。给定一个关于未知量u的微分方程或差分方程，假定一个"变量替换"$u=Mv$引进一个新的未知量v。则

$$\frac{du}{dt}=Au \quad 变成为M\frac{dv}{dt}=AMv \quad 或 \quad \frac{dv}{dt}=M^{-1}AMv$$

$$u_{n+1}=Au_n \quad 变成为Mv_{n+1}=AMv_n \quad 或 \quad v_{n+1}=M^{-1}AMv_n$$

在方程中的新矩阵是$M^{-1}AM$，在$M=S$这种特殊情形下，方程组被分离开来，而且正规模式被独立地展开。用附录A的语言来说，特征向量被选作空间的一组新基，而原来的变换被表示成一个对角矩阵$S^{-1}AS=\Lambda$。这是最大可能的简化，但是其他的不那么有力的简化也是有用的；即使$M\neq S$，我们也可以期望$M^{-1}AM$比A本身更容易使用。

首先，假定我们考察所有可能的M。这就产生一个矩阵$M^{-1}AM$的族。它们被称为是相互**相似**的（且相似于A）；由A到$M^{-1}AM$的变换称为一个相似变换。这些矩阵中任何一个都可以通过变换$u=Av$，出现在此微分方程或差分方程中，所以它们应该有某些东西是共同的，而且确有：**相似矩阵有相同的特征值。**

50 若$B=M^{-1}AM$，则A和B有相同的特征值，而且每个特征值有相同的重数。

证明是很简单的，B的特征值是下式的根

$$\begin{aligned}\det(B-\lambda I)&=\det(M^{-1}AM-I)=\det(M^{-1}(A-\lambda I)M)\\&=\det M^{-1}\det(A-\lambda I)\det M\\&=\det(A-\lambda I)\end{aligned}\tag{48}$$

因为A和B有相同的特征多项式，所以它们有相同的特征值。若x是对一个给定的λ的特征向量，则

$$Ax=\lambda x\text{或}MBM^{-1}x=\lambda x\text{或}B(M^{-1}x)=\lambda(M^{-1}x)$$

这又一次证明了λ也是B的特征值——而且相应的特征向量是$M^{-1}x$。

$M^{-1}AM$正是在解$Ax=b$过程中产生的；在那里基本的运算是用一个矩阵去乘A（只从左边去乘）使得从一行中减去另一行的一个倍数。这样一个变换令A的核和行空间不变，但对求特征值没有任何作用。与此相反，相似变换令特征值不变，而且事实上这些特征值通过一系列简单的相似变换而实际被求出。这个矩阵一步步地变成一个三角形矩阵，而特征值先后出现在主对角线上（这样一系列变换在第七章中被描述，而且在下面第二个练习中解释了这个步骤）。这个方法比直接计算多项式 $\det(A-\lambda I)$ 要好得多（这

个多项式的根就是特征值)。在实践中，把全部的信息都注入多项式，然后再从中得出它来，这样做是不可能的。

练习5.6.1 证明若B通过M与A相似，而且C通过M'与B相似，则C与A相似。什么样的矩阵与单位矩阵相似？

练习5.6.2 考虑一个任给的A和一个特殊的矩阵M：

$$A=\begin{pmatrix} a & b & c \\ b & e & f \\ g & h & i \end{pmatrix} \qquad M=\begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

选取一个旋转角θ，使得$M^{-1}AM$中（3，1）元素化为零。

注 这个"化零"不容易继续下去，因为在d和h位置上产生零的旋转将把在C处所得到的零变成非零元素。对任何大小的矩阵，我们不得不保留主对角线下方一斜行上的元素，从而用不同的方式来完成特征值的计算。不然的话，一个多项式的根可以仅使用确定θ的方根而求出，而这是不可能的。

练习5.6.3 （a）若A可逆，求一个M，它可以证明AB与BA是相似的，于是它们有相同的特征值。

（b）先推导出AB与BA有相同的迹，然后对于

$$A=\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \qquad B=\begin{bmatrix} q & r \\ s & t \end{bmatrix}$$

通过把主对角元素相加直接证明这个事实。

（c）由迹证明：对任何A和B不可能有$AB-BA=I$。在Hilbert空间中，这是量子力学的一个基本方程，而且它有解：

$$Au=\frac{du}{dx}, \qquad Bu=xu,$$

$$(AB-BA)u=\frac{b}{dx}(xu)-x\frac{du}{dx}=u\,^{*}。$$

---

* Von Neumann把无限维的线性代数作为量子力学的数学基础，动量A和位置B是Heisenberg的不定性原理（uncertamty principle）的一个配对。

通过酉矩阵M化为三角形矩阵

我们第一次超出通常情况$M=S$的方式多少有点奇怪：我们不是允许更一般的M，而走上另一途径。即：限制它是酉矩阵。这个问题是寻求某种适当的简单的形状，使得在这个限制下，$M^{-1}AM$能达到这种形式，除非特征向量组是正交的，对角阵Λ是不可能的；但是下列的"Schur引理"得出一种形式，它至少在理论上是非常有用的*。

5P 对任何方阵A，存在一个酉矩阵$M=U$使得$U^{-1}AU=T$是上三角的。T与A有相同的特征值，而且位于它的主对角线上。

证 任何矩阵，例如4×4矩阵，至少有一个特征值λ_1；在最坏的情形中，它可以是四重的，但无论如何A至少有一个特征向量x。我们把x单位化成一个单位向量x_1，并将它置于U的第一列。在这个步骤里，其它三个列是不可能确定的，所以我们可用任何办法造完这个矩阵只是保证它是酉矩阵即可，并称之为U_1。（Gram-Schmidt过程保证这一定可以作到。）乘积$U_1^{-1}AU_1$至少它的第一列符合要求：$Ax_1=\lambda_1x_1$意味着

$$AU_1=U_1\begin{pmatrix}\lambda_1 & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & * & * & *\end{pmatrix}\quad\text{或}\ U^{-1}AU_1=\begin{pmatrix}\lambda_1 & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & * & * & *\end{pmatrix}$$

第二步，我们来处理右下角的3×3矩阵。这个矩阵有一个特征值λ_2和一个单位特征向量x_2，它可以当作3×3酉矩阵M_2的第一列。则

$$U_2=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & & & \\ 0 & & M_2 & \\ 0 & & & \end{pmatrix}$$

* 本章的余下部分更多地注重于理论方面。

且 $$U_2^{-1}(U^{-1}AU_1)U_2=\begin{pmatrix} \lambda_1 & * & * & * \\ 0 & \lambda_2 & * & * \\ 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & * & * \end{pmatrix}$$

最后，在最后一步中，右下角2×2矩阵的一个特征向量扩成一个酉矩阵M_2，它置于U_3的右下角，而且

$$U_3^{-1}(U_2^{-1}U_1^{-1}AU_1U_2)U_3=\begin{pmatrix} \lambda_1 & * & * & * \\ 0 & \lambda_2 & * & * \\ 0 & 0 & \lambda_3 & * \\ 0 & 0 & 0 & * \end{pmatrix}=T$$

乘积$U=U_1U_2U_3$仍是酉的（练习5.5.15），我们得到所要的$U^{-1}AU=T$*。

因为这个引理可用于所有矩阵，它常使我们可以摆脱A是可对角化的假设。例如：我们可以用它来证明：当所有$|\lambda_i|<1$时，幂A^k趋于零，而在所有$\mathrm{Re}\,\lambda_i<0$时，指数函数e^{At}趋于0——甚至不需要有完备的特征向量组，而在5.3和5.4节中对稳定性理论总要假定它的。

练习5.6.4 若$A=\begin{bmatrix} 4 & -5 \\ 2 & -3 \end{bmatrix}$，重复证明中的步骤，求出$U^{-1}AU=T$。

练习5.6.5 对$A=\begin{bmatrix} 3 & -1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$求一个三角形矩阵$U^{-1}AU=T$。

练习5.6.6 证明Cayley-Hamilton定理：任何矩阵满足它自己的特征方程。若$P(\lambda)=\det(A-\lambda I)$则$P(A)=0$。提示：例如在$3\times3$的情况，通过乘出三角形矩阵的积$P(T)=(T-\lambda_1)(T-\lambda_2)\cdot(T-\lambda_3)$，先证明$P(T)=0$，然后把$A=UTU^{-1}$代入$P(A)=(A-\lambda_1)$

* 对较大的矩阵，证明用数学归纳法去做。

$(A-\lambda_2)(A-\lambda_3)$并证明$P(A)=0$。

对角化Hermite矩阵；谱定理

作为这个三角标准形的一个应用，我们证明任何一个Hermite矩阵，无论它的特征值有无重数，都有一个完备的单位正交特征向量组，这个论证分为两步：

(i)若A是埃尔米特的，而U是酉矩阵，则$U^{-1}AU$自然是Hermite的：

$$(U^{-1}AU)^H=U^HA^H(U^{-1})^H=U^{-1}AU$$

(ii)于是由定理5P得出的矩阵$T=U^{-1}AU$既是上三角的又是Hermite的。所以它必定是对角的，T必定与A相同，只要A是Hermite的。

5Q 任何Hermite矩阵A可以被一个适当的酉矩阵对角化。

注1 对任何斜Hermite矩阵K这同样是正确的，因为$K=iA$。

注2 若A是实的且对称，则它的特征向量也是实的（或者至少可以选为实的）。于是U是实的且是酉矩阵——换句话说，它是一个正交矩阵。

注3 对于Hermite矩阵来说，即使它有重特征值，仍然有一个完备的正交特征向量组。我们可以把A视为具有两两不同特征值的Hermite矩阵的极限，而且当趋于此极限时，这些特征向量保持相互垂直。与此相反，非Hermite矩阵

$$A(\theta)=\begin{bmatrix}0 & \cos\theta\\ 0 & \sin\theta\end{bmatrix}$$

它有特征向量$\begin{bmatrix}1\\ 0\end{bmatrix}$和$\begin{bmatrix}\cos\theta\\ \sin\theta\end{bmatrix}$。当$\theta\to 0$时，第二个特征向量趋于第一个——它是不可对角化的矩阵$\begin{bmatrix}0 & 1\\ 0 & 0\end{bmatrix}$的仅有的特征向量。

注4 即使对于一个具有重特征值$\lambda_1=\lambda_2=1$，$\lambda_3=-1$的矩阵

$$A=\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix}=A^H$$

谱定理仍然是正确的。单位正交特征向量组的一种取法是

$$x_1=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\\0\end{pmatrix}\quad x_2=\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}\quad x_3=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\\0\end{pmatrix}$$

它们是酉矩阵U的列向量组，而且$A=U\Lambda U^H$成为

$$A=\sum\lambda_i x_i x_i^H=\lambda_1\begin{pmatrix}\frac{1}{2}&\frac{1}{2}&0\\\frac{1}{2}&\frac{1}{2}&0\\0&0&0\end{pmatrix}+\lambda_2\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&0\\0&0&1\end{pmatrix}$$

$$+\lambda_3\begin{pmatrix}\frac{1}{2}&-\frac{1}{2}&0\\-\frac{1}{2}&\frac{1}{2}&0\\0&0&0\end{pmatrix}$$

但是因为$\lambda_1=\lambda_2$，前两个射影（每个是秩一的）组合起来给出一个秩 2 的射影P_1，而且A是

$$\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix}=\lambda_1P_1+\lambda_2P_2=(+1)\begin{pmatrix}\frac{1}{2}&\frac{1}{2}&0\\\frac{1}{2}&\frac{1}{2}&0\\0&0&1\end{pmatrix}$$

$$+(-1)\begin{pmatrix}\frac{1}{2}&-\frac{1}{2}&0\\-\frac{1}{2}&\frac{1}{2}&0\\0&0&0\end{pmatrix}$$

相应于$\lambda=1$有一个特征向量组成的平面；我们的x_1和x_2或多或少可以任意选取。于是$x_1x_1^H$和$x_2x_2^H$也同样是有一定的任意性，只是它们的和——到这个平面上的射影P_1——是唯一确定的。每个具有k个不同特征值的埃尔米特矩阵有它自己的"谱分解"$A=\lambda_1P_1+\cdots+\lambda_kP_k$。其中$P_i$是到$\lambda_i$的特征子空间的射影矩阵。因为有一个完备的特征向量组，这些射影矩阵加起来等于单位矩阵。而且因为特征子空间是正交的，不同两个射影矩阵的乘积必定为零：$P_jP_i=0$。

练习5.6.7 （a）求一个酉矩阵U使得$U^{-1}AU=\Lambda$，若

$$A=\begin{pmatrix}1&1&1\\1&1&1\\1&1&1\end{pmatrix}\quad 和\quad \Lambda=\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&0\\0&0&3\end{pmatrix}$$

然后对$\lambda=0$求出另一对单位正交特征向量x_1和x_2。

（b）对这两对向量验证$P=x_1x_1^H+x_2x_2^H$是相同的。

练习5.6.8 分两步证明每一个酉矩阵A是可对角化的：

（i）若A是酉的且U也是酉的，则$T=U^{-1}AU$也是酉矩阵。

（ii）一个上三角的酉矩阵一定是对角的。由此得出定理中的上三角阵T是Λ，而且任何酉矩阵（特征值两两不同与否）都是一个完备的单位正交特征向量组：$U^{-1}AU=\Lambda$。所有的特征值满足$|\lambda|=1$。

我们已经非常接近于回答一个自然而又重要的问题，而且能够很好地完成余下的任务：对于什么样的矩阵它的三角标准形T与对角阵Λ相同？Hermite矩阵，斜Hermite矩阵和酉矩阵都是属于这一类的矩阵：它们分别对应实轴，虚轴和单位圆上的数。现在我们要找到这一类矩阵的全体，它们对应着所有复数。

5R 矩阵N称为是正规的，若它与N^H可交换的：$NN^H=N^HN$。对这样的矩阵，而且仅仅对这样的矩阵，三角标准形$T=U^{-1}NU$是对角阵Λ。正规矩阵也恰是具有完备的单位正交特征向量组的矩阵全体。

注意到：Hermite（或斜Hermite）矩阵当然是正规的：若$A=A^H$，则AA^H与A^HA都等于A^2。酉矩阵也是正规的：UU^H和U^HU都等于单位矩阵。在这些特殊情况下，我们分两步证明了$T=\Lambda$，而对任意的正规矩阵，我们也分同样的两步去做：

（i）如果N是正规的，则$T=U^{-1}NU$也是正规的：

$$TT^H=U^{-1}NUU^HN^HU=U^{-1}NN^HU=U^{-1}N^HNU$$
$$=U^HN^HUU^{-1}NU=T^HT$$

（ii）一个上三角矩阵T若是正规的，则它必定是对角的（练习5.6.10）。

于是若N是正规的，三角标准形 $U^{-1}NU$ 一定是对角的，而且因为它与N有相同的特征值，所以它一定是Λ。N的特征向量是U的列向量，而且它们是单位正交的。事实上，N有与Hermite矩阵一样的谱定理，$N=U\Lambda U^{-1}=\sum\lambda_ix_ix_i^H$；唯一的差别是特征值$\lambda$不需要是实的。

练习5.6.9 求一个不是Hermite，斜Hermite，酉或对角的正规矩阵。

练习5.6.10 设T是一个3×3上三角阵，它的元素是t_{ij}。比较TT^H与T^HT的元素，并证明如果它们相等，则T一定是对角阵。

练习5.6.11 证明一个具有单位正交特征向量组的矩阵必定是正规阵：若$U^{-1}NU=\Lambda$，则$NN^H=N^HN$。

Jordan标准形

到本节为止，我们已得到用酉相似所能得到的最好的结果：要求M是一个酉矩阵，我们能够使$M^{-1}AM$成一个三角形矩阵T。现在我们放弃对M的这个限制，任何矩阵都允许，而目标是使$M^{-1}AM$尽可能接近对角阵。

这个使之对角化的最大努力的结果是Jordan标准形J。在矩阵A有完备的线性无关特征向量组的情形中，我们取$M=S$而且使$J=S^{-1}AS=\Lambda$；这时Jordan形J与对角阵Λ相同。对于一个有缺

陷的矩阵这是不可能的，而且对每个丢失了的特征向量，Jordan形在它的主对角线上方位置将有一个 特征值将出现在主对角线上，因为 J 是三角形的。而且就像对角的情形一样，不同的特征值可以被分开考虑：只有重特征值λ可能（也可能不！）要求一个 J 的对角线上方的 1 。

5S 若A有S个无关的特征向量，则它相似于一个如下形状的矩阵

$$J=M^{-1}AM=\begin{pmatrix} J_1 & & & \\ & \cdot & & \\ & & \cdot & \\ & & & \cdot \\ & & & & J_S \end{pmatrix}$$

每一个Jordan块J_i是一个三角形矩阵，它只有单一的特征值且只有一个特征向量：

$$J_i=\begin{pmatrix} \lambda_i & 1 & & \\ & \cdot & \cdot & \\ & & \cdot & \cdot \\ & & & \cdot & 1 \\ & & & & \lambda_i \end{pmatrix}$$

同一个特征值λ_i可以出现在几个块中，如果它对应几个无关的特征向量的话。两个矩阵相似当且仅当它们有相同的 J 。

很多作者在他们的线性代数教程的最高峰给出这个定理。老实说，我认为这是一个错误。不错，不是所有的矩阵都是可对角化的，而且Jordan标准形是最一般的情况。但是由于各种原因，它的结构是技巧性很强的而且是极端不稳定的（A的微小变化就可能把所有丢失了的特征向量都拉了回来而且去掉了对角线上方的1）。因此这些材料的正确位置是在附录之中*，而且引入Jordan标准形的最好方法是考察一些特殊的而且容易办理的例子。

我们介绍其中的两个：

---

* 每个作者都试图使这些材料容易理解。我相信 Filippov 的新证明是最好的。即使改变我们的决定把 J 的构造由附录移到正文文中也是足够简单的。

$$A=\begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad 和 \quad B=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

因为零是这两个矩阵的一个三重特征值，它将在每个Jordan块中：或者仅有一个 3 × 3 Jordan块，或者有一个 2 × 2 块及一个 1 ×1 块，或者三个 1 × 1 块。于是可能的Jordan标准形是

$$J_1=\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_2=\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$和 \quad J_3=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

在A的情形中，仅有的特征向量是$(1,0,0)^T$。于是它的Jordan形中有一个块，而且按照主要定理6 S，A必定于J_1相似。矩阵B有另一个特征向量$(0,1,0)^T$，从而它的Jordan形是J_2；沿主对角线必定有两个块。至于J_3，它自成一类。与零矩阵相似的唯一矩阵是$M^{-1}0M=0$

在这些例子中，关于特征向量的简单计数就足以确定J——而且当没有什么比三重特征值更复杂的事情时这总是可能的。但是最后一个练习说明作为一种一般理论，这种计数技巧是行不通的。

练习5.6.12求一个矩阵M使得$M^{-1}BM=J$

练习5.6.13　证明这些Jordan形矩阵中任何两个都不相似：$J_1\neq M^{-1}J_2M$，$J_1\neq M^{-1}J_3M$而且$J_2\neq M^{-1}J_3M$。

练习5.6.14　对于以零为四重特征值的 4 × 4 矩阵写出所有可能的Jordan标准形矩阵（为方便起见，这些块依大小排列）若有两个无关的特征向量，证明J有两种不同的可能性。

相似变换一览表

1． A是**可对角化的**：S的列是A的特征向量，而且$S^{-1}AS=\Lambda$是对角的。

2． **A是任意的**：M的列是A的特征向量和广义特征向量，而且Jordan标准形$M^{-1}AM=J$是分块对角的。

3． A是**任意的**而且U是酉的：U可以被选取使得$U^{-1}AU=T$是上三角的。

4． A**是正规的**，$AA^H=A^HA$：U可以被选取使得$U^{-1}AU=\Lambda$。特殊情形，所有都有单位正交特征向量组：

a． 若A是埃尔米特的，则Λ是实的。

a'． 若A是实对称的，则Λ是实的而且$U=Q$是正交矩阵。

b． 若A是斜埃尔米特的，则Λ是纯虚的。

c． 若A是酉的，则所有$|\lambda_i|=1$。

复 习 题

5.1 求$A=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 2 & 8\end{bmatrix}$的特征值和特征向量，并选取一个$S$，使得$S^{-1}AS$是对角的。

5.2

$$A=\begin{bmatrix}0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\\ 1 & 0 & 0 & 0\end{bmatrix}$$

求特征多项式$det(A-\lambda I)$和特征值。

5.3 若A有特征值0和1，相应的特征向量是$\begin{bmatrix}1\\ 2\end{bmatrix}$和$\begin{bmatrix}2\\ -1\end{bmatrix}$。你能否预先说明$A$是对称的？它的迹和行列式是什么？$A$是什么？

5.4　在上面的练习中，A^2的特征值和特征向量是什么？A^2与A有什么关系？

5.5　是否存在这样的一个矩阵A，使得对所有数c，$A+cI$是可逆的？

5.6 若$A=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 2 & 1\end{bmatrix}$求$A^9$和$e^A$。

5.7　现有两种利息：第一种年息5％，逐日复利为期三年，然后以6％再为期三年；第二种正好倒过来，先以6％为期三年，再以5％为期三年，你喜欢哪一种？

5.8　解方程

$$du/dt=\begin{bmatrix}3 & 1\\ 1 & 3\end{bmatrix}u\text{，}\qquad \text{若}u_0=\begin{bmatrix}2\\ 0\end{bmatrix}\text{。}$$

5.9　若　$A=\begin{bmatrix}3 & 1\\ 1 & 3\end{bmatrix}$　求e^{At}。

5.10　求上述矩阵A的所有平方根。

5.11　下列事实成立与否（若不成立请用反例说明），

(i)若由B由A交换两行而得到，则B与A相似。

(ii)若一个上三角阵相似于一个对角阵，则它本身就是对角的。

(iii)下面结论中任何两个蕴含着第三个，A是Hermite的，A是酉的，$A^2=I$。

(iv)若A和B是可对角化，则$A+B$也可对角化。

5.12　若

$$A=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 1\\ 0 & 1 & 1\end{bmatrix}$$

求一个正交矩阵Q和一个对角阵Λ，使得$Q^TAQ=\Lambda$。

5.13　把$\begin{bmatrix}1 & 1\\ 0 & 0\end{bmatrix}$分解为$A+K$，使得$A=A^H$且$K=-K^H$。

5.14　写出一个3×3矩阵，它的每一行加起来等于1，证明$\lambda=1$是

它的一个特征值，相应的特征向量是什么？

6.15 如果我们按反向前进，Fibonacci序列将是什么样的？F_{-k}与F_k有什么关系？法则$F_{k+2}=F_{k+1}+F_k$依然有效，所以$F_{-1}=1$。

第六章　正定矩阵

§6.1　极小、极大和鞍点

到目前为止，我们还一直没有理由去关心特征值的符号问题。是的，尚不知特征值λ是否为实数之前，提出它是正的还是负的，为时还过早。但是，在第五章中曾经指出，最重要的矩阵：实的对称矩阵以及复的Hermite矩阵确有实特征值。因而，弄清特征值是否为正就是一件有意义的事了。并且，我们的目的之一是找出一个准则，将其直接用于对称矩阵A时，在不计算它的特征值的情况下，便可预先确认，它的全部特征值都是正的。

在着手寻找这样一个准则以前，让我们来讲述一个新的情形，在这种情形下，特征值的符号是有意义的。它和研究微分方程的稳定性完全不同，微分方程的稳定性问题，需要负的特征值，而不是正的。对于这一点我们不应一笔带过，但是，倘若属于下面的情况，则我们情愿如此办理：如果$-A$满足我们正在寻找的准则的话，那么方程$du/dt=Au$，对于每一个特征值$\lambda<0$，都有衰减解$e^{\lambda t}x$，而方程$d^2u/dt^2=Au$，对于$\omega=\sqrt{-\lambda}$，有纯振荡解$e^{i\omega t}x$。新提出来的这个问题，在很多科学、工程技术以及每一个优化问题的应用场合中都会遇到。所以，我们希望读者对这些是清楚的，因而我们便将直接从数学的提法开始。

这是一个求极小的问题，下面让我们用两个例子来介绍它：

$$F(x,\ y)=7+2(x+y)^2-y\sin y-x^3+y^4$$

和

$$f(x\cdot y)=2x^2+4xy+y^2$$

这两个函数是否有哪一个在$x=y=0$处达到极小值？

注1　零阶项$F(0,\ 0)=7$和$f(0,\ 0)=0$，对答案没有影响。

它们的变化只不过使函数F和f的图象上下移动而已。

注2 线性项给出必要条件：给定点若是极小点，它就应当是稳定点。对此，在点$x=y=0$处的一阶导数值应当等于零，而且确实也是如此：

$$\frac{\partial F}{\partial x}=4(x+y)-3x^2=0,$$

$$\frac{\partial F}{\partial y}=4(x+y)-y\cos y-\sin y+4y^3=0,$$

$$\frac{\partial f}{\partial x}=4x+4y=0,$$

$$\frac{\partial f}{\partial y}=4x+2y=0.$$

因此，原点是这两个函数F和f的稳定点。从几何的概念来说，曲面$z=F(x, y)$与水平面$z=7$相切，而曲面$z=f(x, y)$与平面$z=0$相切。问题是，当我们离开切点$x=y=0$时，F和f的图象是否均位于各自的地平面之上。

注3 二阶项，或者换句话说，二阶导数是决定性的：

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}=4-6x=4,$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x\partial y}=\frac{\partial^2 F}{\partial y\partial x}=4,$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial y^2}=4+y\sin y-2\cos y+12y^2=2,$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}=4$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x\partial y}=\frac{\partial^2 f}{\partial y\partial x}=4,$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}=2.$$

这些导数已经包含了问题的答案。既然两个函数 F 和 f 在点 $x=y=0$ 处的二阶导数相同，那么这些一样的导数值就应该包含相同的答案。这样，这两个函数的图象在原点附近表现完全相同，并且，当且仅当 f 在坐标原点取得极小值时，F 在这一点才取得极小值。

注4 函数 F 的更高阶项不影响局部极小的问题。但是，可能有碍于整体极小。我们的例子，正是这样一种情况：$-x^3$项迟早必使函数F趋向 $-\infty$，而不管其在$x=y=0$ 附近的情况如何。这样的情况，对于函数f或者更一般地对于任何其它二次型（不具有更高次的项）都是不会发生的。任何一个二次型 $f=ax^2+2bxy+cy^2$都以坐标原点为其稳定点。即$\partial f/\partial x=0$，$\partial f/\partial y=0$。如果点$x=y=0$是其局部极小点，那么这点同样是它的整体极小点。曲面$z=f(x,y)$的形状将像一只碗，放在坐标原点这个点上。

我们来总结一下：F的局部极小问题与f局部极小问题的等价性，如果F的稳定点是$x=\alpha$，$y=\beta$，而不是$x=0$，$y=0$，那么唯一的改变就是利用该函数在点(α,β)上的二阶导数了：

$$f(x,y)=\frac{x^2}{2}\frac{\partial^2F(\alpha,\beta)}{\partial x^2}+xy\frac{\partial^2F(\alpha,\beta)}{\partial x\partial y}+\frac{y^2}{2}\frac{\partial^2F(\alpha,\beta)}{\partial y^2} \tag{1}$$

这时，f在$(0,0)$点附近的性态与F在(α,β)点的性态完全一样。

我们暂且不考虑$F''=0$ 的可能情况，这种情况甚至对于单变量的函数也是非常头疼的了。那时需要引入三阶导数，因为二阶导数给不出确定的解。为了避免这些困难，通常要求，二次部分是非退化的：即对真正的极小，仅在$x=y=0$点，才允许 f 等于零。在所有其它点严格大于零的二次型称为正定的。

现在，问题归结如下 对于两个变量的函数而言，用什么来正确地替代$F''>0$ 的条件？在单变量的情况下，二阶导数的符号就足以确定其为极大或极小；但是，现在我们有三个二阶的导数：F_{xx}，$F_{xy}=F_{yx}$和F_{yy}，这三项准确决定函数f，它们也应当像f一样确定

F是否有极小。a、b、c在怎样的条件下，能保证$f=ax^2+2bxy+cy^2$的正定性呢？

我们很容易求得一个必要条件.

(i)如果f正定，则一定有$a>0$。

我们仅仅考虑一点$x=1$，$y=0$，在这一点，$ax^2+2bxy+cy^2$等于a，如果f正定，a的值应当大于零。针对函数F，这就意味着$\partial^2F/\partial x^2>0$；我们固定值$y=0$，仅使$x$变化，对于极小，我们就应当有$F''>0$。同样，如果我们固定值$x=0$，仅使$y$变化，这就会产生系数$c$的条件：

(ii)如果f正定，则一定有$c>0$。

不那么容易确定的是，条件(i)和(ii)合在一起是否为二次型f正定的充分条件？有无必要考虑混合导数系数b？

例 $f=x^2-10xy+y^2$。这里，$a=1$和$c=1$均为正值，然而，假使我们选择点$x=y=1$，由于$f(1,1)=-8$，那么，二次型f不是正定的。在这里，条件$a>0$和$c>0$保证f沿x和y轴方向增长，但是，它仍可能沿着其它直线下降，直线$x=y$就是这种情况。系数b可能压倒a和c。实际上，只看f沿着任意直线的升降情况，是不能断定它的正定性的。

很显然，问题的解决要依赖于b。原函数f的系数b是正的，这是否足以保证为极小呢？回答又是否定的，而b的符号是无足轻重的。如原二次型为$2x^2+4xy+y^2$，尽管其所有系数均为正值，但它却不是正定的，并且无论F还是f都没有极小。因为沿直线$x=-y$，我们有$f(1,-1)=2-4+1=-1$。

这样，为了使得f是正定的，正是b的取值范围（与a和c相比较）应该被控制。我们试图找出一个正定性的充分必要条件的精确准则。最简单的方法是把f配成“完全平方”：

$$f=ax^2+2bxy+cy^2$$

$$=a\left(x+\frac{b}{a}y\right)^2+\left(c-\frac{b^2}{a}\right)y^2. \qquad (2)$$

显然，左端的第一项是正的，这是因为它是与正系数a相乘的完全平方——正系数a这个必要条件(i)依然有效。然而，当$x=b$和$y=-a$时，此平方项等于零，且在这点我们有$f(b,-a)=a(ac-b^2)$。因此，需要一个新的必要条件：

(iii)如果f正定，则一定有$ac>b^2$。请注意，条件(i)和(iii)综合起来，就会自动地导致条件(ii)：如果$a>0$和$ac>b^2\geqslant0$，那么一定有$c>0$。毫无疑问，(2)式的右端这时将是正的，这样，我们最终就得到了问题的解答。

6A 二次型$f=ax^2+2bxy+cy^2$正定的**充分必要条件**是$a>0$和$ac-b^2>0$。相应地F在$x=y=0$有**严格极小的充分必要条件是**

$$\frac{\partial^2F(0,0)}{\partial x^2}>0,$$

$$\left[\frac{\partial^2F(0,0)}{\partial x^2}\right]\left[\frac{\partial^2F(0,0)}{\partial y^2}\right]>\left[\frac{\partial^2F(0,0)}{\partial x\partial y}\right]^2.$$

由此不难得到极大的条件，因为$-f$有极小时，f就有极大。这意味着a、b和c取与原来相反的符号，而实际上使第二个条件$ac-b^2>0$不变：二次型负定的充分必要条件是$a<0$和$ac-b^2>0$。这些变化对F也是适用的。

当$ac-b^2=0$时，二次型是奇异的，这种情况，是我们到目前为止一直未考虑的。此时，(2)式的第二项就会消失，仅留下一个单方项$f=a(x+(b/a)y)^2$，这一项或当$a>0$时，半正定；或当$a<0$时半负定。所谓“半”，即可以使f等于零，例如，在点$x=b$，$y=-a$时就是这种情况。在几何上，这就意味着，曲面$z=f(x,y)$由一个“碗”退化成一个无限长的“槽”（在三维空间中考虑这一曲面$z=x^2$，那么这个槽沿y轴左右移动，并且每一个横断面将是同一条抛物线$z=x^2$）。$a=b=c=0$的条件给出更加奇异的二次型，它既是半正定又是半负定，一个碗就完全成为一个平面。

在一元的情况下，函数$F(x)$的全部可能性为：或者F有极小，或者它有极大，或者$F''=0$。然而两个变量时，还有一种非常重要的

可能性，即$ac-b^2$可能是负的。在我们的例子中，当量b优于a和c时，就会有这种情况；并且相应地，f在一些方向上是正的，而在另一些方向是负的。如果a和c有相反的符号，不管b的情况如何，这种情况也一定发生。x和y轴的方向给出相反的结果，f在一个轴上增加，而在另外一个轴上减少，在此来看下面两个例子是有益的：

$$f_1=2xy, \qquad f_2=x^2-y^2。$$

上述第一个例子中b占优势（$a=c=0$）；第二个例子中a和c有相反的符号。两种情况都是$ac-b^2=-1$。

这是不定二次型，因为它们可能有任何符号，即随x和y的变化，既能够使$f>0$，又能够使$f<0$。这样，稳定点既不是极大点也不是极小点，我们称之为鞍点（可能因为，曲面$z=f(x, y)$，譬如，$z=x^2-y^2$，具有鞍形而得名：它沿着y轴下降且沿着x轴上升）。试设想一条翻越山峦的小路，如果沿着山脉看，这条小路的顶点乃是极小，但当你沿此小路行走时，举目望去，它是极大（图6.1）。

鞍形$2xy$和x^2-y^2实际上是一样的，如果将其中之一旋转45°角，那么，我们就得到另外一个，同时，它们也几乎是画不出来的。

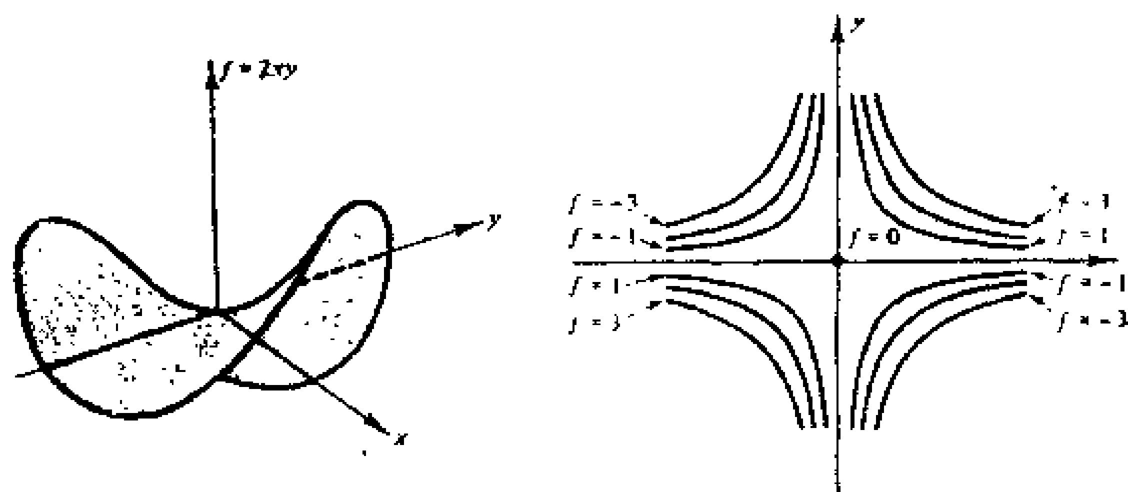


图 6.1 鞍形 $f=2xy$ 和它的等高线

练习6.1.1 求证二次型$f=2x^2+4xy+y^2$在坐标原点有鞍点。

尽管它的系数是正的。并指出，如何将f写成两个完全平方差的形式。

为得到极小条件，似乎只要计算一下 $Fxx>0$ 和 $FxxFyy>(Fxy)^2$ 即可。然而，如果我们懂得，如何将f的系数组成对称矩阵 A，便可以用线性代数作更多的事情。如果ax^2和cy^2项的系数管于矩阵的对角线上，而$2bxy$项的系数劈成对角线上和对角线下的元素，那么二次型f将恒等于这样一个矩阵的乘积：

$$ax^2+2bxy+cy^2=\begin{bmatrix}x, y\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a & b\\ b & c\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\ y\end{bmatrix}. \qquad (3)$$

这个等式，是整章的一个关键。可以把它改写为$f=x^TAx$，并且立即推广到一般n维情况。这样简化形式的记法，对于研究极大和极小问题是很方便的。当有n个独立变量x_1，x_2，…，x_n，而不单是x和y时，它们形成一个列向量$x=(x_1, x_2, \cdots, x_n)^T$。这时，对于任意一个$n$阶对称矩阵$A$，乘积$f=x^TAx$为一纯二次型。它有一个稳定点在坐标原点，并且不包含更高阶的项：

$$f=x^TAx=[x_1x_2\cdots x_n]\begin{bmatrix}a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n}\\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n}\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\\ \vdots\\ x_n\end{bmatrix}$$

$$=a_{11}x_1^2+a_{12}x_1x_2+a_{21}x_2x_1+\cdots+a_{nn}x_n^2$$

$$=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}a_{ij}x_ix_j \qquad (4)$$

给定一在坐标原点有稳定点的函数$F(x_1, x_2, \cdots, x_n)$（它在该点的所有的一阶导数均为零），我们将用海瑟矩阵（Hessian matrix）A研究函数的极小、极大或鞍点。矩阵A的元素是由二阶导数$a_{ij}=\partial^2F/\partial x_i\partial x_j$构成的。而矩阵$A$自然是对称的，因为项$a_{12}x_1x_2$和$a_{21}x_2x_1$彼此相等（这相应于二维情形$2bxy$的分解）。同时，当$f$正定时，或者换句话说，矩阵正定时，函数有一极小。这就是说：对所

有的非零向量x成立

$$x^TAx>0。\qquad (5)$$

练习6.1.2 研究下列矩阵的正定性，并且写出相应的函数f：

(a) $A=\begin{bmatrix}1 & 3\\ 3 & 5\end{bmatrix}$， (b) $A=\begin{bmatrix}1 & -1\\ -1 & 1\end{bmatrix}$.

(c) $A=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}$， (d) $A=\begin{pmatrix}2 & -1 & 0\\ -1 & 2 & -1\\ 0 & -1 & 2\end{pmatrix}$.

在情形(d)中，以三项平方和的形式写出x^TAx，在情形(b)中，请注意，奇异矩阵相应于奇异二次型（两者均由A的行列式$ac-b^2=0$所认同）。请确定，沿怎样的直线f恒等于零？

练习6.1.3 对于正定函数曲线$f(x,y)=1$是一个椭圆（这个曲线是曲面$z=f(x, y)$ 被平面$z=1$所截的截痕）画出$a=c=2$，$b=-1$这个椭圆。

练习6.1.4 决定下列函数在给定点具有极小、极大或鞍点。

(a)$F=-1+4(e^x-x)-5x\sin y+6y^2$ 在点$x=y=0$，

(b)$F=(x^2-2x)\cos y$在稳定点$x=1$，$y=\pi$。

§6.2 判定正定性的准则

对于一切非零向量x，怎样的对称矩阵具有性质$x^TAx>0$呢？对此问题的解答有四、五种不同的方法，我们希望把这所有的方法都找出来。上一节我们只初步谈了有关特征值符号的某些见解，但未作深入的探讨，而只涉及到矩阵元素的两个条件：如果

$$A=\begin{bmatrix}a & b\\ b & c\end{bmatrix},$$

那么A正定的充分必要条件是$a>0$，$ac-b^2>0$。我们的目的是把这些条件推广到n阶矩阵，并且找出这条件与特征值符号的关系。在二阶矩阵时所形成的条件，起码说明它的两个特征值都是正的。事实

上，它们的结果乃是行列式$ac-b^2>0$，于是，两个特征值或均为正，或均为负。但是由于它们的和是矩阵A的迹$a+c>0$，因此两个特征值必定都是正的。

值得注意的是，这两个办法，一个直观易算，而另一个更多地着眼于矩阵的内在性质（它的特征值）。其实，如果更仔细地看一下第一个准则，甚至就可以辨认出矩阵的主元素。若将f写成平方和的形式，它们则变成：

$$ax^2+2bxy+cy^2=a\left(x+\frac{b}{a}y\right)^2+\frac{ac-b^2}{a}y^2,$$

系数a和$(ac-b^2)/a$恰为二阶矩阵A的主元素。如果这种关系对于高阶矩阵同样有效，那么，这就将给出一个非常简单的判别矩阵正定性的准则。现在让我们检查一下这些主元素。这个准则有一个十分简单的解释：二次型x^TAx正定当且仅当它可被写成n个独立的平方和的形式。

还有一点要预先说明一下。本书的两部分是由行列式的理论所联系起来的。因此，我们便提出一个问题，在矩阵的正定性中，行列式起什么作用。显然，条件$\det A>0$对于矩阵A的正定性是不充分的，因为$a=c=-1$和$b=0$时，此条件是满足的，但我们得到矩阵$A=-I$，它是负定的。重要的一点是行列式准则不仅用于矩阵A本身，给出$ac-b^2>0$，而且还要用于处在它的左上角一阶子矩阵a。下面的n个左上方子矩阵都满足这个条件将是上述结论向n维情况的自然推广：

$$A_1=(a_{11}),\qquad A_2=\begin{bmatrix}a_{11}&a_{12}\\a_{21}&a_{22}\end{bmatrix},$$

$$A_3=\begin{pmatrix}a_{11}&a_{12}&a_{13}\\a_{21}&a_{22}&a_{23}\\a_{31}&a_{32}&a_{33}\end{pmatrix},\cdots,\ A_n=A.$$

下面是主要定理及其详细证明。

62　下列每一个准则均为实对称矩阵A正定的充分必要条件：

(Ⅰ)$x^TAx>0$，对所有非零向量x成立。

(Ⅱ)矩阵A的所有特征值λ_i均为正的。

(Ⅲ)所有子矩阵A_k的行列式均大于零。

(Ⅳ)所有主元素d_i（无行交换）都是正的。

证明　准则(Ⅰ)是正定矩阵的定义。作为第一步，我们指出准则(Ⅰ)与(Ⅱ)等价。为此，首先假设满足准则(Ⅰ)，然后确定矩阵A的每一个特征值λ_i均为正。理由很简单，假设x_i为相应的规范化的特征向量，即$x_i^Tx_i=1$。那么

$$Ax_i=\lambda_ix_i,\qquad \text{于是}\quad x_i^TAx_i=x_i^T\lambda_ix_i=\lambda_i,$$

因为$x_i^Tx_i=1$。根据准则(Ⅰ)，由$x^TAx>0$对所有非零向量x都成立，因而也必包含特征向量$x=x_i$，所以$x_i^TAx_i=\lambda_i$同样应当是正的。于是得知，正定的矩阵的特征值均为正。

现在，假设所有$\lambda_i>0$，证明$x^TAx>0$（这里需要对任意非零向量x进行证明）。因为对称矩阵具有一组完备的正交特征向量组x_1，x_2，…，x_n，所以任意向量x均可表示为它们的线性组合$x=c_1x_1+c_2x_2+\cdots+c_nx_n$，从而有

$$\begin{aligned}Ax&=c_1Ax_1+c_2Ax_2+\cdots+c_nAx_n\\&=c_1\lambda_1x_1+c_2\lambda_2x_2+\cdots+c_n\lambda_nx_n,\end{aligned}$$

由其正交性及规范化$x_i^Tx_i=1$，有

$$\begin{aligned}x^TAx&=(c_1x_1+c_2x_2+\cdots+c_nx_n)^T(c_1\lambda_1x_1+\cdots+c_n\lambda_nx_n)\\&=c_1^2\lambda_1+\cdots+c_n^2\lambda_n.\end{aligned}\qquad(6)$$

如果每一个$\lambda_i>0$，并且c_i不全等于零，那么$x^TAx>0$，因此，满足准则(Ⅱ)必满足准则(Ⅰ)。

现在让我们来讨论(Ⅲ)和(Ⅳ)，它们与条件(Ⅰ)的等价性将分三步来证明，首先，如果条件(Ⅰ)成立，那么条件(Ⅲ)亦成立。为此目的，我们指出，任意矩阵的行列式均等于它的特征值的积。所以，如果条件(Ⅰ)成立，我们便已经知道，全部特征值λ_i都是正的；

$$\det A = \lambda_1 \lambda_2 \cdots \lambda_n > 0 \text{。}$$

为了证明对所有的子矩阵A_k也有这样的结果，我们将由矩阵A的正定性推导出所有的A_k的正定性。其方法是考虑所有最后 $n-k$ 个分量均为零的向量x；如果

$$x = \begin{bmatrix} x_k \\ 0 \end{bmatrix},$$

则 $$x^T A x = [x_k^T, \ 0] \begin{bmatrix} A_k & * \\ * & * \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_k \\ 0 \end{bmatrix} = x_k^T A_k x_k.$$

于是，如果对所有的非零向量x有$x^T Ax > 0$，那么，特别地，对所有的非零向量x_k有$x^T{}_k A_k x_k > 0$。这样准则(Ⅰ)对A_k成立，所以，我们应用于A本身的那些论据，同样也适于A_k。其特征值（与A的特征值λ_i不一致！）必然为正，且其行列式为其特征值的乘积。

现在，我们来证明如果条件(Ⅲ)成立，则条件(Ⅳ)亦成立。这个证明很容易，因为子矩阵A_k的行列式与主元素之间有直接的联系。根据4D(21)式，第k个主元d_k恰是$\det A_k$和$\det A_{k-1}$的比。因此，倘若所有行列式均为正值，则所有主元亦将如此，且正定矩阵不允许做行交换。

最后证明，如准则(Ⅳ)成立，则准则(Ⅰ)亦成立。给定了主元素为正，我们就必须要推导出$x^T Ax > 0$。这正是对于二阶矩阵，我们用完全平方的方法来证明过的情况。为了证明任意阶矩阵也有相同的结果，需要下列主要事实：在对称矩阵的 Gauss 消元法中，上三角矩阵U等于转置的下三角矩阵L（参看1M），于是分解式$A = LDU$变为$A = LDL^T$。

例

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 1 & 0 \\ 0 & -\frac{2}{3} & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 2 & & \\ & \frac{3}{2} & \\ & & \frac{4}{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 1 & -\frac{2}{3} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = LDL^T.$$

上式从左侧乘以x^T，从右侧乘以x，我们得到平方和。其中主元是平方项的系数：

$$x^TAx = (u\ \ v\ \ w) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 1 & 0 \\ 0 & -\frac{2}{3} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & & \\ & \frac{3}{2} & \\ & & \frac{4}{3} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 1 & -\frac{2}{3} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix}$$

$$= 2\left(u - \frac{1}{2}v\right)^2 + \frac{3}{2}\left(v - \frac{2}{3}w\right)^2 + \frac{4}{3}w^2.$$

正的主元保证$x^TAx > 0$，从而由条件(Ⅳ)得到条件(Ⅰ)。这样，就完成了定理的最后一步的证明*。在复数的情况下，对于Hermite矩阵$A = A^H$该定理依然正确。

如果由条件(Ⅲ)中得到一个印象，认为只是左上角子矩阵A_k才具有非常特殊的含意，那就错了。要知道，我们同样可以检验右下角子矩阵的行列式。或者，我们可以利用任意一串主子矩阵，它从某个对角元a_{ii}开始，以其作为第一个子矩阵，并且每次增加一

---

* 最后一步的证明是用例子进行的，真正的证明将在后面第 238 页中按（Ⅳ）⇒（Ⅴ）⇒（Ⅰ）的步骤进行。

个具有相同号码的新行和新列。特别地，矩阵A正定的一个必要条件乃是a_{ii}为正，这恰是x^2_i的系数。然而正如我们从例子中所看到的那样，单看对角元是远不够充分的。

无论在怎样的情况下，主元d_i都不能跟特征值λ_i混为一谈，对于典型的正定矩阵，这是两个截然不同的正数集合。在我们的三阶矩阵的例子中，采用行列式的（准则(Ⅲ)）准则或许是最简单的。

$$\det A_1 = 2, \quad \det A_2 = 3, \quad \det A_3 = \det A = 4$$

对于高阶矩阵，用主元消去法会更简单些。在我们所考虑的例子中主元为$d_1 = 2$，$d_2 = 3/2$，$d_3 = 4/3$。通常，应用特征值准则是最为繁锁的。但是，对于这个例子，我们知道它们都是正的：

$$\lambda_1 = 2 - \sqrt{2}, \quad \lambda_2 = 2, \quad \lambda_3 = 2 + \sqrt{2}.$$

我们指出，虽然，最后一个准则用于具体的矩阵A是最复杂的，然而理论研究上却是最有用的。

练习6.2.1 研究下列矩阵的正定性

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ -1 & -1 & 2 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

$$C = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 2 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}.$$

应用分解式$B = LDL^T$，将$x^T Bx = u^2 + v^2 + w^2 + 2uw$记作平方和的形式。

练习6.2.2 建立一个其最大的元素位于主对角线上，例如，形为$A = \begin{bmatrix} 1 & \alpha & \beta \\ \alpha & 1 & \alpha \\ \beta & \alpha & 1 \end{bmatrix}$ $\quad |\alpha| < 1, \ |\beta| < 1$

且甚至不是半正定之矩阵（计算$\det A$）。

练习6.2.3 如果矩阵A正定，求证矩阵A^2和A^{-1}亦正定。

练习6.2.4 如果矩阵A和B正定，求证矩阵$A+B$亦正定。这里准则Ⅰ—Ⅳ中，哪一个有用？

希望大家允许我再引进一个正定性的准则。实际上我们已经很接近这个准则了。它应该使我们更好地理解前述各准则。

6C 矩阵A正定当且仅当它满足条件

（Ⅴ）存在这样的非奇异矩阵W，使得

$$A=W^TW$$

如果此新的条件成立，则

$$x^TAx=x^TW^TWx=\|Wx\|^2 \tag{7}$$

这个量当然是正的，或者至少是非负的。关键的问题是对于非零向量x，Wx是否等于零。由于W是非奇异的，$Wx=0$只可能在$x=0$时发生。所以准则（Ⅴ）就蕴含了准则（Ⅰ）：$x^TAx>0$对于所有非零向量成立。所有这一切很象3V中加权的最小二乘法。最通用的长度度量乃是$\|Wx\|$，且此长度之平方引出正定的矩阵$A=W^TW$。

最后，还要指出，如果矩阵A满足条件（Ⅰ）——（Ⅳ），那么它同样满足条件（Ⅴ）。为此，我们需要构造矩阵W，实际上，我们已两次几乎做到了这一点：

（i） 在主要定理证明的最后一步，曾建立了矩阵A的分解LDL^T。由于矩阵A的主元是正的，那么如选对角阵作为$\sqrt{D}$，同时其对角元为相应主元的平方根，则我们可得到A的分解：$A=L\sqrt{D}\sqrt{D}L^T$*。这样，W的选择之一为上三角矩阵$\sqrt{D}L^T$。这就证明了条件（Ⅳ）蕴含着条件（Ⅰ）。

（ii） 另一方法，用条件（Ⅱ）而不用条件（Ⅳ），会给出另外一个矩阵W。因为矩阵A的特征值均为正值，且其特征向量构成一个使A对角化之正交矩阵Q，那么A的分解

$$A=Q\Lambda Q^T=Q\sqrt{\Lambda}\sqrt{\Lambda}Q^T=(\sqrt{\Lambda}Q^T)^T(\sqrt{\Lambda}Q^T).$$

这样，W就具有了和心理学家用之进行主要成份分析的同样的表达

---

* 此为所谓Cholesky（乔勒斯基）分解，主元均匀地分解于上、下三角阵乘项之间。它与Gauss等式$A=LDL^T$几无差别，本人通常避免这些平方根的计算。

式$\sqrt{\Lambda}Q^T$。

练习6.2.5 如果 $A=\begin{bmatrix}2 & -1\\ -1 & 2\end{bmatrix}$请用上述两个方法构成矩阵$W$。

练习6.2.6 计算上一练习中矩阵A的平方根$R=Q\sqrt{\Lambda}Q^T$。从数值和公式两方面，验证R是对称的且$R^2=A$。R的特征值是正的平方根$\sqrt{\lambda_i}$；所以不难证明R是A的唯一对称正定的平方根。同时R也是W的另外一个可能的选择。

练习6.2.7 如果矩阵A是正定的，且C是非奇异的，求证矩阵$B=C^TAC$也是正定的。

练习6.2.8 如果埃米特矩阵$(A^H+A)/2$是正定的，我们便可称非对称矩阵A是"正定的"。对于这样的矩阵，尽管x^HAx可能复数，但是，它的实部$\frac{1}{2}(x^HAx+x^HA^Hx)$将是正的。

(a) 证明，对于这样的矩阵，它的每一个特征值的实部都是正的（提示：考虑向量$Ax=(\alpha+i\beta)x$和x^H数积的实部）。

(b) 以二阶三角矩阵为例，证明甚至在矩阵A^H+A为非正定的情况下，该二阶三角矩阵之特征值亦可能为正（在5K稳定性理论中，对于方程$u'=Au$来说，负定的A^H+A曾经意味着其解在每一个瞬时都是下降的，但是没有这个条件，方程也可能是稳定的）。

练习6.2.9 写出矩阵A为负定的条件。请特别注意条件Ⅱ：$\det(-A)$和$\det A$之间应有何种联系？

n维椭球

要了解一个正定矩阵的几何意义，方程$x^TAx=1$为关键问题。满足此方程的诸向量x均位于n维空间之某曲面上。现在我们来证明，这是一个椭球。或者更准确地说，是中心在坐标原点的n维椭球。

例 假设$A=\begin{bmatrix}2 & -1\\ -1 & 2\end{bmatrix}$和$x=\begin{bmatrix}u\\ v\end{bmatrix}$，且$x^TAx=2u^2-2uv+2v^2=1$，那么，为了分析此方程，最好的办法是将其改写成平方和的形式，并以矩阵A之特征值$\lambda_1=1$和$\lambda_2=3$为系数：

$$2u^2-2uv+2v^2=1\left(\frac{u}{\sqrt{2}}+\frac{v}{\sqrt{2}}\right)^2$$

$$+3\left(\frac{u}{\sqrt{2}}-\frac{v}{\sqrt{2}}\right)^2=1 \qquad (8)$$

判定括号内之表达式。我们记之为W和Z，那么，该方程将具有$W^2+3Z^2=1$的形式，其图形将是通常的椭圆。其长轴之端点为点$W=1$，$Z=0$，短轴之端点为$W=0$，$Z=\frac{1}{\sqrt{3}}$。换句话说，长半轴长度等于$1/\sqrt{\lambda_1}$，短半轴长度等于$1/\sqrt{\lambda_2}$(图6.2)。此外，这些轴的方向与相应的特征向量$x_1=(1/\sqrt{2},1/\sqrt{2})$和$x_2=(1/\sqrt{2},-1/\sqrt{2})$之方向相一致。这表明，正定性的几何意义与矩阵的特征向量和特征值是紧密相关的。

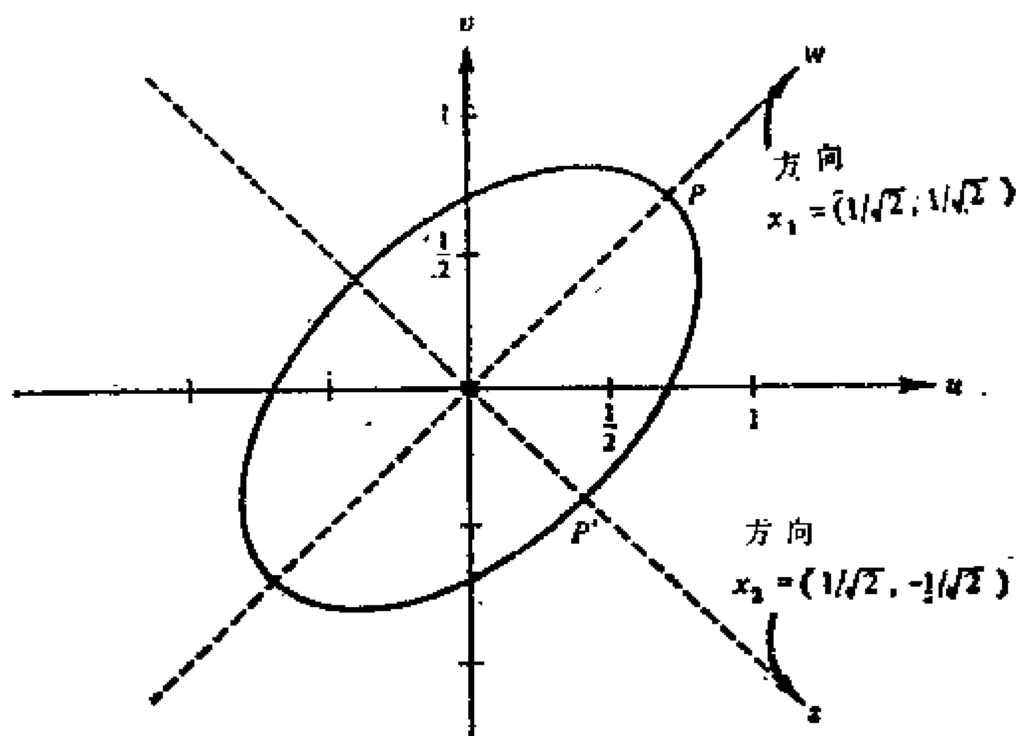


图 6.2 椭圆$2u^2-2u^2+2u^2=1$

如果我们懂得方程(8)的演变过程，那么，对于任意的曲面$x^TAx=1$，我们也可做同样的安排。关键的步骤照例是利用正交矩阵Q

对角化矩阵A：$Q^{-1}AQ=\Lambda$或$A=Q\Lambda Q^T$，其中Q之各列为矩阵A的单位特征向量x_j，这就得到了平方和的形式：

$$x^TAx=(x^T)\begin{bmatrix} x_1 x_2 \cdots x_n \end{bmatrix}\begin{bmatrix}\lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1^T \\ \vdots \\ x_n^T\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\end{bmatrix}$$

$$=\lambda_1(x_1^Tx)^2+\cdots+\lambda_n(x_n^Tx)^2.$$

现在，我们引进新的变量$y_1=x_1{}^Tx$，…，$y_n=x_n{}^Tx$——用矩阵记法，这恰是$y=Q^Tx$——并且曲面方程简化为

$$x^TAx=\lambda_1y_1{}^2+\cdots+\lambda_ny_n{}^2=1$$

这是一般情况，方程(8)只是它的一个特例。甚至在这个一般情况中，也显而易见，曲面上有一个点是$y_1=1/\sqrt{\lambda_1}$，$y_2=y_3=\cdots=y_n=0$，该点位于长轴之端点，并且离坐标原点最远。此外，对应的向量x是第一个特征向量的倍数，或者确切地说$x=x_1/\sqrt{\lambda_1}$。在图6.2上此点标有字母P。离坐标原点最近的点位于短轴的端点，且有坐标$y_1=y_2=\cdots=y_{n-1}=0$，$y_n=1/\sqrt{\lambda_n}$。在图6.2上，这个点标有字母P'。它位于最后一个特征向量x_n所给定的直线上。中间特征向量给出中间轴。

6D 假设A是正定的矩阵，并且它的单位特征向量是矩阵Q的列：$A=Q\Lambda Q^T$，则旋转变换$y=Q^Tx$产生平方和

$$x^TAx=x^TQ\Lambda Q^Tx=y^T\Lambda y$$
$$=\lambda_1y_1{}^2+\cdots+\lambda_ny_n{}^2 \tag{10}$$

方程$x^TAx=1$描绘出一个椭球，其第j个轴之端点，位于这样的坐标为y_1，y_2，…，y_n之点上，这里，第j个分量y_j由条件$\lambda_jy_j{}^2=1$确定，其余的$y_i=0$（$i\neq j$，$i=1$，2，…，n）。这些点在矩阵A的特征向量所给出的直线上，并且对应半轴的长度为$1/\sqrt{\lambda_j}$。

练习6.2.10 椭圆$u^2+4v^2=1$对应矩阵$A=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 4\end{bmatrix}$，写出矩阵$A$的特征值和特征向量，并且画出这个椭圆。

练习6.2.11 用求出对应矩阵A之特征值的办法，把方程$3u^2-2\sqrt{2}uv+2v^2=1$化为平方和之形式，并画出此椭圆。

练习6.2.12 当所有的$\lambda_i>0$时，方程$\lambda_1 y_1^2+\lambda_2 y_2^2+\lambda_3 y_3^2=1$是三维空间的一个椭球。在半正定的情况下，即当一个或几个特征值为零时，描绘出各种可能形式的曲面。

§6.3 半定和不定矩阵

特征值问题的推广：Ax=λBx

既然正定性准则全面确立起来了。所以，在本节我们把网稍稍撒大一点。

我们认为这里有三个问题：

（1） 半正定矩阵的准则。

（2） 对称矩阵的特征值和主元之间的关系。

（3） 推广特征值问题$Ax=\lambda Bx$。

对于第一个问题，我们可以很容易地给出答案，因为对此所要作的工作已经完成。第二和第三个问题取决于对称矩阵的所谓"惯性"定律。从数学的观点来看，该定律乃是本节的主要结果。此定律的推论之一是：特征值的符号决定主元符号。而另一个推论是：如果矩阵B正定，那么问题$Ax=\lambda Bx$的特征值与通常的$Ax=\lambda x$的特征值有相同的符号。问题$Ax=\lambda Bx$的特征向量"彼此正交"，但方式与前不同。对于应用来说，推广的特征值问题是非常重要的。我们在本节中研究一个例子，在§6.5中再研究一个与有限元方法有关的例子。

对于半正定矩阵，主要之点在于搞清其与正定的情况之相似性。

6E 下列每一个准则均为矩阵A半正定的充分与必要条件：

（Ⅰ′） $x^TAx\geq 0$对所有向量x成立。

（Ⅱ′） A的所有特征值均为非负值：$\lambda_i\geq 0$。

（Ⅲ′） 所有的主子阵均有非负的行列式。

（Ⅳ′） 所有主元d_i均满足条件$d_i \geqslant 0$。

（Ⅴ′） 存在某个使$A=W^TW$的矩阵W（可以是奇异的）。

如果A的秩是r，则$f=x^TAx$可表成r个完全平方之和。

$x^TAx \geqslant 0$和$\lambda_i \geqslant 0$之间的关系，这是最主要的，完全如前面所述：对角化矩阵$A=Q\Lambda Q^T$导致

$$
\begin{aligned}
x^TA^Tx &= x^TQ\Lambda Q^Tx = y^T\Lambda y \\
&= \lambda_1 y_1{}^2 + \cdots + \lambda_n y_n{}^2
\end{aligned} \tag{11}
$$

并且当所有λ_i为非负时，此式亦为非负。如果A的秩为r，则有r个非零特征值和r个完全平方。

至于矩阵A之行列式，由于它等于A之所有特征值λ_i之乘积，所以亦必非负。既然原矩阵A之所有主子阵亦为半正定，则它们的特征值和行列式也必$\geqslant 0$；这样，我们已经推论出了准则(Ⅲ′)(矩阵A之主子阵是用去掉同标号之行与列的方法构成的。例如，去掉第一和第四行和列，对于子阵来说仍将保持其对称性。对于主子阵同时也保持半正定性：如果对于所有x，均有$x^TAx \geqslant 0$，则当x的第一和第四分量为零时，此不等式依然成立。）这里的新情况是，(Ⅲ′)适用于所有主子阵，不只是适用于左上角的主子阵。否则，我们就无法区分其左上角行列式均为零的两个矩阵。例如，$\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$为半正定矩阵，$\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$为半负定矩阵。对于半正定矩阵来说，其主元仍为行列式之比，从而为非负值。唯一的问题是可能需要行交换。为了不破坏矩阵的对称性，我们应同时交换相应的列。这就意味着，"对称消元"不是对矩阵PA而是对矩阵PAP^T实现的。既然此种交换仅仅移动了主子阵，而保持了它们的行列式不变，故(Ⅲ′)稳妥地蕴含了条件(Ⅳ′)：r次消元之后，右下角所剩的子矩阵恒为零，且$d_{r+1}=\cdots=d_n=0$。

最后，实现条件(Ⅳ′)意味着存在有$PAP^T=LDL^T$（或$A=P^TLDL^TP$）的分解关系。同时，这里的对角阵D，其对角线上为非负的主元。现在选择$W=\sqrt{D}L^TP$，我们就得到$A=W^TW$，也就是说，

我们建立了条件(Ⅴ′)，而由(Ⅴ′)立即导致(Ⅰ′)，因为 $x^TAx = x^TW^TWx = \|Wx\|^2 \geqslant 0$，这就完成了所要证明的论点 6E 的一个循环。

例 矩阵

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ -1 & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

根据下列准则为半正定性：

(Ⅱ′)特征值 $\lambda_1 = 0$，$\lambda_2 = \lambda_3 = 3$，非负。

(Ⅲ′)所有的一阶主子阵行列式都等于2；二阶者都等于3，且 $\det A = 0$。

(Ⅳ′)因为

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ -1 & -1 & 2 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{3}{2} & -\frac{3}{2} \\ 0 & -\frac{3}{2} & \frac{3}{2} \end{pmatrix} \to$$

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{3}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

那么其主元为 $d_1 = 2$，$d_2 = 3/2$，$d_3 = 0$。

练习6.3.1 对于上例中的矩阵 A，求出矩阵 W，并把 $x^TAx = \|Wx\|^2$ 写成两个平方和之形式。在三维空间中描绘出曲面 $x^TAx = 1$。

练习6.3.2 由6E中选任三个准则用于矩阵

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

如果B是Hermite矩阵，证明$A=B^2$是正半定的。

说明，半正定之条件亦可由原始条件(Ⅰ)～(Ⅴ)以下述方法导出：将单位矩阵之某一小倍数ϵI加到原矩阵A上，得到正定矩阵$A+\epsilon I$，并使ϵ趋近于零。因为特征值与行列式连续地依赖于ϵ，则它们将直至最后一个时刻一直为正：$\epsilon=0$时，它们仍应为非负值。

合同变换及惯性定律

在本书的前一些部分，对于消元及特征值问题，我们曾经把重点放在使原矩阵简化的基本运算上。在每一种情况下，最主要的是要知道该矩阵的哪些性质是不变的。当某一行减去另一行的倍数时，"不变者"的清单是相当长的：核，行空间，秩和行列式均不变。关于特征值问题，基本运算曾是相似变换$A\to S^{-1}AS$（或$A\to M^{-1}AM$），而特征值本身是不变的（根据附录B，其若当形亦不变）。现在，关于对称矩阵，我们提出同样的问题：对于x^TAx来说，什么是基本运算，什么是不变的？

进行变量的变换是对二次型的基本运算。用某非奇异矩阵C通过$x=Cy$把新的向量y与原来的x联系起来，于是二次型就变成了形式y^TC^TACy。因此，对于二次型理论来说，堪称最基础的运算就是合同变换了：

$$A\to C^TAC,\ C\text{为某非奇异矩阵。}$$

这种变换仍然保留了A的对称性，这是因为矩阵C^TAC仍是对称的。但是，在进行合同变换之后，矩阵A还有什么其它性质是不变的呢？西勒维斯特(Sylvester)**惯性定律**给出了该问题的答案。

6F 矩阵C^TAC和矩阵A具有相同数目的正特征值，负特征值和零特征值。

换言之，特征值的符号（并非特征值本身），在合同变换过程中是不变的。在此论点的证明中，为方便起见，我们假设矩阵A是非奇异的。那么，C^TAC亦必为非奇异的，因此勿需顾虑有零特征值存在（如不这样假设，我们可用非奇异矩阵$A+\epsilon I$和$A-\epsilon I$，最后

令$\varepsilon \to 0$）。

为证明6F，我们想借用拓扑学的一个技巧，或者更确切点说用同伦理论中的一个技巧。假设矩阵C通过不间断的一个矩阵链$C(t)$和某正交矩阵Q相联系，同时该矩阵链中无一为奇异者，且$t=0$时$C(0)=C$，$t=1$时，$C(1)=Q$。那么，随着t从零变到1，$C^T(t)AC(t)$的特征值将从C^TAC之特征值渐变至Q^TAQ的特征值。因为$C(t)$中无一为奇异者，故$C^T(t)AC(t)$矩阵无一特征值会触及到零（更不说会通过零了！）。因此，对于矩阵C^TAC来说，其大于零的特征值数目和小于零的特征值数目均分别与矩阵Q^TAQ相同。因矩阵A和与其相似的矩阵$Q^{-1}AQ=Q^TAQ$具有完全相同的特征值，故矩阵A也有与上述数目相同的正的和负的特征值*。于是6F证完。

例1 如果$A=I$，则$C^TAC=C^TC$，且此矩阵为正定的（在条件（V）中取$C=W$）。这里单位矩阵I和矩阵C^TC之所有特征值均为正数。符合惯性定律。

例2 如果$A=\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$。则矩阵$C^TAC$的行列式为负值：

$$\det C^TAC=(\det C^T)(\det A)(\det C)=-(\det C)^2<0.$$

因为此行列式为特征值的积，故C^TAC和A一样必有一正特征值和一负特征值。这是符合惯性定律的。

例3 惯性定律的下述应用是很重要的：

6G 对任一对称矩阵A来说，其主元之符号是与其特征值的符号相一致的。矩阵A的正特征值数目，负特征值数目和零特征值数目分别和主元矩阵D的正、负和零主元数目相等。

我们知道，$A=Q\Lambda Q^T$，其中Q为正交矩阵，Λ为对角矩阵，其对角元是矩阵A的特征值。乔勒斯基公式为：

$$A=LDL^T，\text{或}D=L^{-1}A(L^T)^{-1}=(L^{-1}Q)\Lambda(L^{-1}Q)^T \tag{13}$$

---

*) 正是在这里，我们需要Q是正交的。一种较好的选择Q的方法是把Gram-Schmidt过程用于矩阵C的诸列，这样，令$C=QR$，此处R是具有E对角元的上三角矩阵。那么，可选择矩阵组$C(t)=tQ+(1-t)QR=Q[tI+(1-t)R]$作为联系$C$与$Q$的连续链。事实上，在任意$t\in[0，1]$时，矩阵$C(t)$为非奇异的。因为$Q$是可逆矩阵，而第二乘项$tI+(1-t)R$为有正对角元之上三角矩阵。

我们选$C=(L^{-1}Q)^T$。那么，根据惯性定律，矩阵$D=C^TAC$和矩阵A具有同符号的特征值，且D的这些特征值同时也是矩阵A的主元。因此，矩阵A的正特征值的数目与其正主元的数目相一致。

练习6.3.3 对矩阵$C=\begin{bmatrix}2 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}$和$A=\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & 1\end{bmatrix}$，验证矩阵$C^TAC$和矩阵$A$有同符号的特征值。你能否构造一非奇异之矩阵链$C(t)$，以实现从$C$到正交矩阵$Q$的过渡？

练习6.3.4 利用主元的符号，证明矩阵

$$A=\begin{bmatrix}1 & 3 & 0\\ 3 & 8 & 7\\ 0 & 7 & 6\end{bmatrix}$$

有一个负的和两个正的特征值。然后求出矩阵$A+2I$的主元，并证明，矩阵A的特征值加2就会使它们全变成正值。因而矩阵A的负特征值一定在$-2<\lambda<0$的范围内。

最后这个练习暗示了一个计算特征值的方法，这是我们要介绍的第一个实用方法（1960年前后，这曾是一个占支配地位的方法，现在仍不失其妙用）。其中心思想是不断分割不定区间，一旦我们知道了$-2<\lambda<0$，则下一步就要求出λ大于还是小于-1。矩阵$A+I$的特征值等于矩阵A的特征值加1。通过矩阵$A+I$，我们发现，其主元之一为负值。因此，所求的原λ值小于-1。再下一步就将研究矩阵$A+\frac{3}{2}I$此矩阵仍有一负主元。因此，$-2<\lambda<-\frac{3}{2}$。每一步进展一个二进制位。

对于大对称矩阵，这种方法过于费力，因为每一步要进行$n^3/6$次运算才能求出整个矩阵的主元。但是，如果在计算之前，A能够如在§7.3中所做的那样，变换成三对角矩阵的话，那么，不定区间的每个对半分割，只要进行$2n$次乘法。这样，消元就可以实现得很迅速。用逐步明确不定区间界限的方法求特征值的过程就会变得异常简便。这便是所谓Givens（吉文斯）方法。

推广特征值问题

我对经济学不敢肯定，但我知道，物理学，工程学和统计学通常都希望在特征值问题中产生对称矩阵。然而，它们可能产生两个而不是一个矩阵。$Ax=\lambda x$问题可能被$Ax=\lambda Bx$问题所取而代之。作为这种情况的一个例子，我们来讨论一下两个不等质量的运动问题。

根据牛顿定律，对于第一个质量$F_1=m_1a_1$，对于第二个，$F_2=m_2a_2$。如果我们建立起如图5.2那样弹簧系统，那么F_1和F_2也与前同。其物理意义我们描述如下：如图6.3所示，两质量的位移分别为v和w，弹簧对它们的向后拉力为$F_1=-2v+w$，$F_2=v-2w$。方程式的左边，出现了两个质量，产生了新的重要现象：

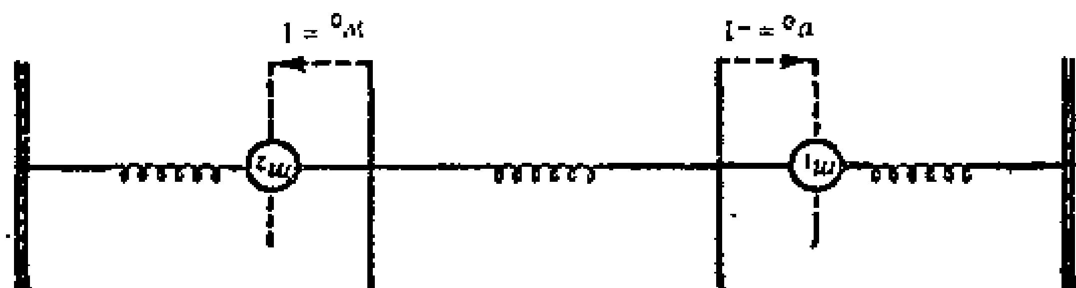


图 6.3

$$m_1\frac{d^2v}{dt^2}=-2v+w$$

$$m_2\frac{d^2w}{dt^2}=v-2w$$

或
$$\begin{bmatrix} m_1 & 0 \\ 0 & m_2 \end{bmatrix}\frac{d^2u}{dt^2}=\begin{bmatrix} -2 & 1 \\ 1 & -2 \end{bmatrix}u.$$

当两质量相等时，即$m_1=m_2=1$，我们便又回到了原来的系统$u''=Au$。而现在是$Bu''=Au$，有“质量矩阵B”，当求指数解$e^{i\omega t}x$时，就产生了特征值问题。

$$Bu'' = Au \text{变成了} \quad B(i\omega)^2 e^{i\omega t}x = Ae^{i\omega t}x。$$

约去$e^{i\omega t}$，以λ代替$(i\omega)^2$，我们得

$$Ax = \lambda Bx \text{或} \quad \begin{bmatrix} -2 & 1 \\ 1 & -2 \end{bmatrix} x = \lambda \begin{bmatrix} m_1 & 0 \\ 0 & m_2 \end{bmatrix} x. \tag{14}$$

只有在矩阵$A-\lambda B$奇异的情况下，该系统才有解。因此，λ必须是多项式方程$\det(A-\lambda B)=0$的一个根。如果，在这里我们选取$B=I$，则我们又回到了通常的方程$\det(A-\lambda I)=0$。

下面我们讨论$m_1=1$、$m_2=2$的例子：

$$\det(A-\lambda B)=\det\begin{bmatrix} -2-\lambda & 1 \\ 1 & -2-2\lambda \end{bmatrix}=2\lambda^2+6\lambda+3,$$

$$\lambda=\frac{-3\pm\sqrt{3}}{2}.$$

两特征值均为负值，且两自然频率为$\omega_i=\sqrt{-\lambda_i}$。相应的特征值向量$x$可用通常的方法计算出来：

$$(A-\lambda_1 B)x_1=\begin{pmatrix} \frac{-1-\sqrt{3}}{2} & 1 \\ 1 & 1-\sqrt{3} \end{pmatrix} x_1=0,$$

$$x_1=\begin{bmatrix} \sqrt{3}-1 \\ 1 \end{bmatrix},$$

$$(A-\lambda_2 B)\ x_2=\begin{pmatrix} \frac{-1+\sqrt{3}}{2} & 1 \\ 1 & 1+\sqrt{3} \end{pmatrix} x_2=0,$$

$$x_2=\begin{bmatrix} 1+\sqrt{3} \\ -1 \end{bmatrix}.$$

这些特征向量将给出正常方式的振动。在较低频率ω_1的情况下，两质量一起振动(向同一方向移动)，其差别在于，第一个质量最大之

位移仅为$\sqrt{3}-1\approx0.73$，而第二个，即较大之质量，由于某种原因，则具有较大的振幅。在较高频率ω_2的情况下，向量x_2的分量具有相反的符号，因而两质量向相反方向移动。这时，较小的质量将会较远地振离平衡位置。

如果B能预先被分解成W^TW的形式（正如此例中那样，这里我们认为B为正定矩阵），那么下述理论是很容易解释的。做过变量$y=Wx$的替换之后，方程$Ax=\lambda Bx=\lambda W^TWx$就变成了$AW^{-1}y=\lambda W^Ty$的形式。现在我们用$C$代替$W^{-1}$，并将最后一个方程乘以矩阵$(W^T)^{-1}=C^T$，就使之变成了单一矩阵$C^TAC$标准的特征值问题：

$$C^TACy=\lambda y \tag{15}$$

其中的特征值λ_i与原题$Ax=\lambda Bx$的特征值是相同的，而特征向量是以关系式$y_j=Wx_j$联系起来的*。对称矩阵C^TAC之性质直接导出$Ax=\lambda Bx$的相应性质：

（1） 其所有特征值均为实数。

（2） 根据惯性定律，其特征值与矩阵A之特征值具有相同的符号。

（3） 特征向量y_j是标准正交的，故原特征向量x_i“B-标准正交的”

$$x_i^TAx_j=x_i^TW^TWx_j=y_i^Ty_j=\begin{cases}1 & 如果\ i=j,\\ 0 & 如果\ i\neq j.\end{cases} \tag{16}$$

如果向量x_j为矩阵S之列，那么(16)就意味着$S^TBS=I$。同理，

$$x_i^TAx_j=\lambda_jx_i^TBx_j=\begin{cases}\lambda_j & 如果\ i=j,\\ 0 & 如果\ i\neq j.\end{cases} \tag{17}$$

用矩阵表示法，这就是说$S^TAS=\Lambda$。并且表明了下面一个值得注意的事实：S之合同变换使矩阵A和B同时对角化。

这一事实的几何意义我们还没有很好地理解。在正定的情况

* 产生单一矩阵的一条捷径似乎是$B^{-1}Ax=\lambda x$，但$B^{-1}A$不一定是对称矩阵，我们宁愿置矩阵B^{-1}的一半于矩阵A的每一侧，以产生对称矩阵C^TAC。

下，$x^TAx=1$和$x^TBx=1$两曲面均为椭球。显然，变换$x=Sz$会给出使这两曲面“正确排放”的新的坐标（并非纯粹的旋转，因为S不是正交矩阵）。

$$x^TAx=z^TS^TASz=\lambda_1z_1^2+\cdots+\lambda_nz_n^2=1,$$
$$x^TBx=z^TS^TBSz=z_1^2+\cdots+z_n^2=1。\qquad(18)$$

其实，第二个椭球乃是一个圆球！当然，此理论的要点还有些朦胧之处，但可以很容易地综述如下：只要矩阵B正定，推广特征值问题$Ax=\lambda Bx$实际上和$Ax=\lambda x$完全相同。

练习6.3.5 在上面我们讨论过的$m_1=1$、$m_2=2$的例子中，证明振动谐波是B正交的，即$x_1{}^TBx_2=0$。如果两质量均被位移一个单位距离，$v_0=-1$，$w_0=1$，然后被放开，求出合成运动$u=a_1\cos\omega_1tx_1+a_2\cos\omega_2tx_2$中的系数$a_i$。第一个质量能够偏离平衡位置的最大距离是多少（当两个余弦相应等于$+1$和-1时）？

练习6.3.6 求出

$$\begin{bmatrix}6 & -3\\ -3 & 6\end{bmatrix}x=\frac{\lambda}{18}\begin{bmatrix}4 & 1\\ 1 & 4\end{bmatrix}x$$

的特征值和特征向量。

练习6.3.7 如果二阶对称矩阵A和B为不正定矩阵，那么$Ax=\lambda Bx$可能具有复特征值。举一相应的例子。

§6.4 最小原理及Rayleigh商

现已接近本书之尾声，在这一节中，我们将第一次偏离线性方程。未知向量x将不作为方程$Ax=b$或$Ax=\lambda x$之解。而改用最小原理来确定。

使人惊奇的是，许许多多自然定律都可以最小原理形式表达出来。重液体一沉到底部的事实，就是使其势能最小化之后果。当你坐在弹簧椅上，或者躺在钢丝床上的时候，弹簧就会调整它们的状态，结果也是使其势能最小。当然，也还有一些“阳春白雪”的例

子：一幢大楼，好似一只非常复杂的椅子，承受着其本身的重量，而建筑工程学最基本的原则，在于使总能量最小。在物理学中，有最小作用量"作用积分"；插入一杯水中的一根筷子在水面处看起来似乎是折的，这是因为光选择传播途径使之到达你的眼睛尽可能快的缘故*)。

我们必须马上就说，这些"能量"不是别的，正是正定的二次型。显然，二次型的导数是线性的。因此，当我们使所有一阶导数都为零时，最小化就会引导到我们所熟悉的线性方程去。本节中，我们的第一个目标是找出对应于$Ax=b$的最小原则，以及对应于$Ax=\lambda x$的最小原则。我们在有限维范围内要做的恰好是变分法在连续问题中所做的事情。在后一种情况下，一阶导数为零将给出一个微分方程（欧拉方程）。在每种情况下，我们可以自由选择，或是求出线性方程的解，或者找出二次型的最小值——在很多问题中，正象下节将要表明的那样，后一可能是不应忽视的。

第一步非常简单：求出其极小点为方程$Ax=b$的解的"抛物线"P。如果A恰好是一个标量，则这一点极易做到：

$$P(x)=\frac{1}{2}Ax^2-bx,\quad 且\frac{dp}{dx}=Ax-b$$

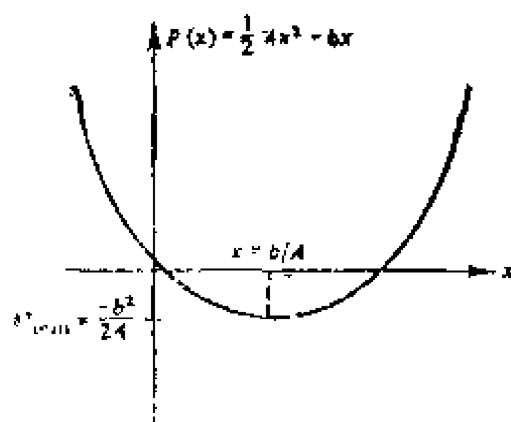
只有在A为正，即此抛物线口朝上开的情况下，才具有最小值的可能。这时一阶导数为零，即得$Ax=b$（图6.4）。在多维的情况下，这个抛物线转为抛物面，但对于P有相同的公式，而且正定性仍是存在极小值的必要条件。

6H 如果A为对称正定矩阵，则二次型$P(x)=\frac{1}{2}x^TAx-x^Tb$在$Ax=b$点处达到最小值。

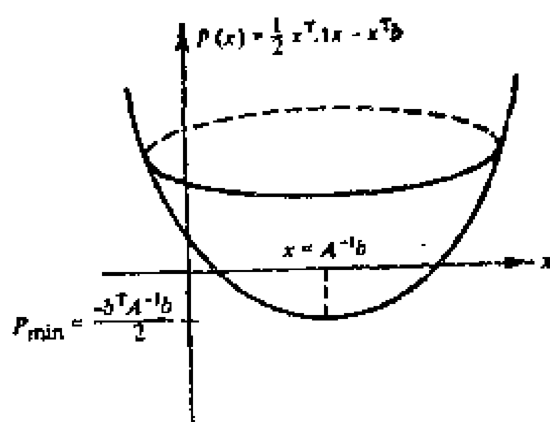
证明 设x为$Ax=b$的解。对于任一向量y，我们可以展开

$$P(y)-P(x)=\frac{1}{2}y^TAy-y^Tb-\frac{1}{2}x^TAx+x^Tb$$

* 我确信，植物和人类的发展也是符合最小原理的；或许，文明本身也是建筑在最小作用定律上的。此类定律的发现乃是从观察现象到解释现象的转化过程中最基本的步骤，并且在社会科学和生物学中必然还有某些类似定律有待人们去进一步发掘。



（a） 抛物线



（b） 两维碗形

图 6.4 二次函数$P(x)$之最小值

$$=\frac{1}{2}y^TAy-y^TAx+\frac{1}{2}x^TAx$$

$$=\frac{1}{2}(y-x)^TA(y-x)。$$

因为A为正定矩阵，故此值永不为负，且仅在$y-x=0$时，才会为零。在所有其它点处$P(y)$均大于$P(x)$，所以最小值点位于x处。

练习6.4.1 考虑下式所给定的方程组$Ax=b$。

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 4 \\ 0 \\ 4 \end{bmatrix}.$$

建立相应的二次型$P(x_1, x_2, x_3)$，计算其偏导数$\partial P/\partial x_i$，并证明这些偏导数恰好在原方程的解处等于零。

练习6.4.2 求函数$P_1=\frac{1}{2}x^2+xy+y^2-3y$和$P_2=\frac{1}{2}x^2-3y$的最小值（如果有的话）。什么样的矩阵$A$对应于函数$P_2$？

练习6.4.3 在$Ax=b$处达到其最小值之另一个二次型为

$$Q(x)=\frac{1}{2}\|Ax-b\|^2=\frac{1}{2}x^TA^TAx$$

$$-x^TA^Tb+\frac{1}{2}b^Tb.$$

把Q与P进行比较，忽略常数项$\frac{1}{2}b^Tb$，在最小值处我们将得到什么方程组？在最小二乘法中这些方程叫什么名称？

我们的第二个目标是求出等价于$Ax=\lambda x$的最小化问题。这一点不太容易。我们所选的函数不可能就是二次型，或者对其微分会导出线性方程——而特征值问题从根本上讲乃是非线性的。这里的方法是探讨两个二次函数之比，我们所需要的这种比值称为 **Rayleigh 商**：

$$R(x)=\frac{x^TAx}{x^Tx}.$$

现在我们直接转向主要定理。

61 Rayleigh原理：第一特征向量$x=x_1$使商$R(x)$具有极小点，而该极小值为最小特征值λ_1：

$$R(x_1)=\frac{x_1^TAx_1}{x_1^Tx_1}=\frac{x_1^T\lambda_1x_1}{x_1^Tx_1}=\lambda_1 \tag{20}$$

首先让我们从几何学的角度来分析这个结论。我们设想将其分子固定为1，而使分母尽可能大。分子$x^TAx=1$决定一个椭球，至少在A为正定的情况下是这样。分母为$x^Tx=\|x\|^2$，故我们求的是椭球上离原点最远的一点——换言之，长度最大的向量x。从前面我们对椭球的描述可知，其长轴（所求的点在此长轴上）的方向是与第一特征向量的方向一致的。

从代数的角度来看，这一点很容易理解（甚至对矩阵的正定性无任何要求）。如果我们用一正交矩阵Q使矩阵A对角化：$Q^{-1}AQ=\Lambda$，且$Q^T=Q^{-1}$，令$x=Qy$，Rayleigh商就要变得简单得多：

$$R(x)=\frac{(Qy)^TA(Qy)}{(Qy)^T(Qy)}=\frac{y^T\Lambda y}{y^Ty}$$

$$=\frac{\lambda_1y_1^2+\cdots+\lambda_ny_n^2}{y_1^2+\cdots+y_n^2}.$$

此商的极小值显然应在坐标为$y_1=1$而$y_2=y_3=\cdots=y_n=0$的点上。

在这一点上，此比值等于λ_1。在其它任何点上，此比值都要大一些，因为λ_1是所有λ中最小者。

$$\lambda_1(y_1^2+y_2^2+\cdots+y_n^2)\leqslant(\lambda_1y_1^2+\lambda_2y_2^2+\cdots+\lambda_ny_n^2)。$$

此不等式两边除以第一括号中的表达式，得$\lambda_1\leqslant R(x)$。这样，极小值发生在第一特征向量上，或者，更确切点说，发生在第一特征向量倍数向量$x=cx_1$上，因为"伸长"因子是不会改变比值的，即：

$$R(cx)=\frac{(cx)^TA(cx)}{(cx)^T(cx)}=\frac{c^2x^TAx}{c^2x^Tx}=R(x)$$

瑞利原理意味着，对于每个向量x，商$R(x)$为λ_1的上界。为了由上界估计λ_1，我们无须求特征向量并转换成y；这在证明中是有用的，但在应用中，我们可以选择完全任意的向量x。

练习6.4.4 对于任意矩阵A和特殊选定的向量$x=(1,0,\cdots,0)$，比值$R(x)$应等于什么？证明λ_1小于或等于矩阵A的每一个对角元a_{ii}。

练习6.4.5 对于矩阵$A=\begin{bmatrix}2&-1\\-1&2\end{bmatrix}$，选一向量$x$使其给出的$R(x)$值小于从矩阵$A$对角元得来的限界$\lambda_1\leqslant 2$。$R(x)$的极小值为多少？

练习6.4.6 如果B为正定矩阵，利用Rayleigh商证明，矩阵$A+B$之最小特征值大于矩阵A的最小特征值。

练习6.4.7 如果λ_1为矩阵A的最小特征值，μ_1为矩阵B的最小特征值。求证矩阵$A+B$的最小特征值至少不小于$\lambda_1+\mu_1$。（提示：将相应特征向量x代入Rayleigh比式。）

最后这两则练习，或许是由Rayleigh原理得来的最典型和最重要的结果。但从特征值方程本身都很难求出。

Rayleigh商的应用不仅仅局限于第一特征值λ_1与其相应的特征向量x_1。其实，显而易见

$$R(x)=\frac{\lambda_1y_1^2+\lambda_2y_2^2+\cdots+\lambda_ny_n^2}{y_1^2+y_2^2+\cdots+y_n^2}\tag{21}$$

此比式之最大值发生在单位向量 y 的序列的另外一端，即在$y_1=y_2=\cdots=y_{n-1}=0, y_n=1$的一点上。此点对应于最后一个特征向量 $x=x_n$，而最大值本身为λ_n。因此，$R(x)$的每一个比值不仅是 λ_1 之上限，同时也是 λ_n 的下界*。最后我们指出，中间诸特征向量 x_2，$\cdots$，x_{n-1}均为Rayleigh商之鞍点。

练习6.4.8 求出(21)式之各偏导数，证明在 $y_1=y_3=\cdots=y_n=0$，$y_2=1$ 处为一稳定点。求比式

$$R'(x)=(x_1^2-x_1x_2+x_2^2)/(x_1^2+x_2^2)$$

之最大值。

特征值的极小极大原理

涉及到鞍点之困难在于，对某个典型的向量 x 来说，我们不能肯定$R(x)$大于抑或小于各中间值$\lambda_2,\cdots,\lambda_{n-1}$。对于应用来说，存在一个真正有用的极值（极小或极大）原理。因此，我们来找出这一原理，让极小或极大值在第 j 个特征向量x_j上得到**。对称矩阵之基本性质向我们提供了下列主导思想：向量x_j与矩阵A的其它特征向量是正交的。因此，假设我们强令向量 x 在极小值原理中与最初的特征向量x_1，x_2，$\cdots$，x_{j-1}正交；这就使$y_1=y_2=\cdots=y_{j-1}=0$。其余向量y_j，$\cdots$，y_n我们未加限制，则Rayleigh商就简化成

$$\frac{\lambda_j y_j^2+\lambda_{j+1}y_{j+1}^2+\cdots+\lambda_n y_n^2}{y_j^2+y_{j+1}^2+\cdots+y_n^2}.$$

其极小值为λ_j，这时$y_j=1$，$y_{j+1}=\cdots=y_n=0$。

6J 在令向量 x 与特征向量x_1，$\cdots$，x_{j-1}正交的情况下，下一个特征向量x_j将使$R(x)$比式有极小点，且该极小值为λ_j，即：

在$x^Tx_1=0$，$\cdots$，$x^Tx_{j-1}=0$的条件下，

$$\lambda_j=\min R(x). \tag{22}$$

---

* 根据练习6.4.4的推理，我们知道，任一对角元均小于λ_n。

** 这个题目有点特殊，这就是我们找出的极小值原理，Rayleigh-Ritz 有限元法即建筑在此原理之上。由此，我们直接转向6.5节不会有任何困难。

同理，在向量x垂直于向量$x_{j+1},\cdots,x_n$时，x将使$R(x)$比式有极大点。

从理论上讲，利用此原理可以按递增顺序求出各特征值。第一个特征值λ_1为$R(x)$的绝对极小值，位于向量x_1上。其次，在x与x_1正交的条件下，λ_2将是$R(x)$比式的极小值。同时，对任何正交于x_1且于x_2不重合的x来说，$R(x)$之值均大于λ_2。

例 矩阵

$$A=\begin{pmatrix} 1 & -1 & & \\ -1 & 2 & -1 & \\ & -1 & 2 & -1 \\ & & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

半正定，且$x_1=(1, 1, 1, 1)$为对应于$\lambda_1=0$之特征向量。对于λ_2，要找出某一上界，我们可试选一个和x_1正交的向量x，并算出$R(x)$的值：

$$x=(1,1,-1,1),\ 且\ \frac{x^TAx}{x^Tx}=1，故\lambda_2\leqslant 1.$$

这里唯一的问题是，如果我们不确知向量x_1(我们很少对其确知)，那么我们就无从知道向量x是否与其正交。在约束极小问题中，约束条件本身应该是已知的。

现在我们要问，对于λ_2和x_2来说是否存在有不要求确知x_1的情况下的极值原理。答案是微妙的。假设x_1未知，在这种情况下，我们只要施以约束条件，使所有试选向量x垂直于某任意向量z。如果$z=x_1$，那么$R(x)$的最小值将等于λ_2。在更为可能的情况下，z有别于x_1，我们仍可能找出关于最小条件的某些要求：该条件极小值将不大于λ_2。换言之，对于任一z，我们有

$$\min_{x^Tz=0} R(x)\leqslant\lambda_2, \tag{23}$$

证明 前两个特征向量的非零组合$x=\alpha x_1+\beta x_2$将正交于z：这只要我们对系数α和β施以单一的限制条件即可。这样，对于任一

此类组合

$$R(x)=\frac{(\alpha x_1+\beta x_2)^T A(\alpha x_1+\beta x_2)}{(\alpha x_1+\beta x_2)^T(\alpha x_1+\beta x_2)}$$

$$=\frac{\lambda_1\alpha^2+\lambda_2\beta^2}{\alpha^2+\beta^2}\leqslant\lambda_2。$$

因为我们已经找到了使$R(x)\leqslant\lambda_2$的向量x，所以$R(x)$之最小值肯定要小于λ_2。这一事实直接导出了下一则“最大值原理”。

6K 如果在满足约束条件$x^Tz=0$的向量x上，我们使$R(x)$极小，且选择使该极小值极大化的z，那么我们可得λ_2：

$$\lambda_2=\max_z\{\min_{x^Tz=0}R(x)\}。\tag{24}$$

根据式（23）我们知道，括号中的值小于或等于λ_2，在$z=x_1$的特殊情况下，比值等于λ_2。

在几何学上，极大极小原理有其自然解释。假设某一椭球被过坐标原点的平面所截割，则截面仍为椭圆，是低一维的椭球。不等式（23）只意味着，此截面的长轴至少要和原椭球的第二轴同长度（在图6.5中这对应于不等式$\mu_1\leqslant\lambda_2$）。

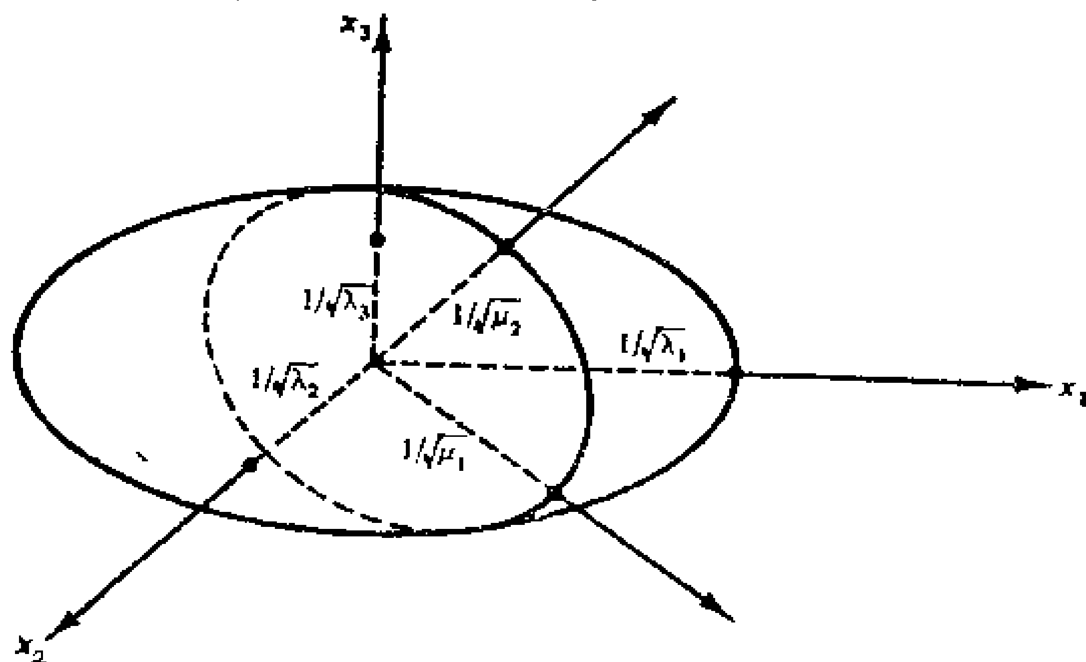


图 6.5 极大极小和极小极大原理：$\lambda_1\leqslant\mu_1\leqslant\lambda_2\leqslant\mu_2\leqslant\lambda_3$

选择特定的截割平面，则截面之长轴将等于原椭球之第二轴。此选择就是正交于原椭球长轴方向 $z=x_1$ 的平面。这时 $\mu_1=\lambda_2$。

此几何解释可以直接译成矩阵代数的术语。

6L 给定一对称矩阵 A，其特征值 $\lambda_1\leqslant\lambda_2\leqslant\cdots\leqslant\lambda_n$，去掉该矩阵的最后一行和最后一列，形成子矩阵 A_{n-1}，那么，如果 μ_1 为此子阵的最小特征值，则它处于 $\lambda_1\leqslant\mu_1\leqslant\lambda_2$ 区间。

首先，我们指出，λ_1 为比式 $R(x)$ 的绝对最小值。下面的步骤是要搞清楚，在 x 的最后一个分量必须为零的约束条件下，μ_1 也是 $R(x)$ 的最小值。此条件最小值不可能低于绝对最小值：$\mu_1\geqslant\lambda_1$。另一方面，x 的最后一个分量必须为零的条件等价于在特别选定 $z=(0,\cdots,0,1)$ 时，$x^Tz=0$ 的约束条件。故根据式(23)，我们有 $\mu_1\leqslant\lambda_2$。

例1 矩阵 $A=\begin{bmatrix}2&-1\\-1&2\end{bmatrix}$ 的特征值为 1 和 3，而舍去最后一行和最后一列所得子矩阵的特征值为 2。

例2 矩阵

$$A=\begin{bmatrix}2&-1&0\\-1&2&-1\\0&-1&2\end{bmatrix}.$$

的特征值为 $2-\sqrt{2}$，2，$2+\sqrt{2}$。当把最后一行和最后一列去掉时，其最小特征值增至 1，但不会超过矩阵 A 的特征值 λ_2：$2-\sqrt{2}<1<2$。

例3 如果 B 正定。则根据Rayleigh商

$$\lambda_1(A+B)=\frac{x^T(A+B)x}{x^Tx}>\min\frac{x^TAx}{x^Tx}=\lambda_1(A).$$

练习6.4.6正是这样的一题。现在极大极小原理(24)对于第二特征值可给出同样的结果：$\lambda_2(A+B)>\lambda_2(A)$，因为当矩阵 B 加到 A 上时，$R(x)$ 又有所增长。

例4 给定某弹簧和质量的振动系统，假定某一质量被强制于平衡位置。则此系统之最低频率就要增长，但不会超过原特征值

λ_2。

练习6.4.9 求出矩阵

$$A=\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

的各特征值，并利用不等式$\lambda_1 \leqslant \mu_1 \leqslant \lambda_2$，求证无论取消哪一个行列对，新的最小特征值必然是$\mu_1=1$。用椭球$x^TAx=1$可以进行什么体育活动？

练习6.4.10 把极大极小原理推广到j个不同的约束条件，其想法和$j=1$时一样：

$$\max_{z_1,\cdots,z_j}\left(\min_{x^Tz_1=0,\cdots,x^Tz_j=0} R(x)\right)=\lambda_{j+1}. \tag{25}$$

取$j=2$，导出舍去矩阵A的最后两行和两列所得子阵的最小特征值的不等式。

现在，我们该把这些定理倒过来，最后得到极小极大原理。这就是说，我们首先要使Rayleigh商极大化，然后求出此极大点的可能具有的极小值。

视欲求特征值的不同情况，可有若干个解此问题的途径。若求最大的特征值λ_n，我们只要求得$R(x)$的极大值，即为答案。但假若，我们现在要求λ_2，因瑞利商为

$$\frac{\lambda_1 y_1^2+\lambda_2 y_2^2+\cdots+\lambda_n y_n^2}{y_1^2+y_2^2+\cdots+y_n^2},$$

故使λ_2为最大值的方法，显然是令$y_3=y_4=\cdots=y_n=0$。这$n-2$个约束条件只留给我们一个二维子空间，即由矩阵A的前两个特征向量x_1和x_2所张成的子空间。此特定的二维子空间中，$R(x)$之最大值为λ_2——但特征向量x_1和x_2是解决此问题的一个环节，然而它们却是未知的。

当类似情况发生在极大极小原理问题中时，我们那时解决问题的主导思想在于选择某任意的约束条件$x^Tz=0$。这里我们仍沿用

这一思想，在某任意的二维子空间中使$R(x)$极大化。我们无从得知，此子空间是否含有任何特征向量，故此法不大可能生效。然而，Rayleigh商的最大值却使我们可以得到对λ_2的估值。在此以前，在$x^T z=0$的条件下，$R(x)$的最小值小于λ_2；现在，在我们所讨论的子空间中，$R(x)$之最大值将大于λ_2。即，如果S_2为R^n的任一二维子空间，则

$$\max_{x \in S_2} R(x) \geqslant \lambda_2. \tag{26}$$

证明 在子空间中，总会有某向量x与第一个特征向量x_1正交，而对此特定的x来说，我们知道，$R(x) \geqslant \lambda_2$。于是我们立即可以得出极小极大原理来：

6M 如果在所有可能的二维子空间S_2中，我们使$R(x)$极大化，则这些最大值中之最小可能值等于λ_2：

$$\lambda_2 = \min_{S_2}\left(\max_{x \in S_2} R(x)\right). \tag{27}$$

括号中的值永远大于或等于λ_2，而对于由矩阵A之第一和第二两个特征向量所张成的特定子空间来说，此值等于λ_2。

练习6.4.11 在上面第二个例子中，求出左上角之二阶子矩阵的最大特征值μ_2，并将其与λ_2和λ_3做一比较。

现在我们以两项说明来结束本节。我希望，甚至勿需细证，凭直觉你们也能理解其正确性。

说明 1 极小极大值原理可由二维子空间推广到j维子空间，并可用它求得λ_j：

$$\lambda_j = \min_{S_j}\left(\max_{x \in S_j} R(x)\right). \tag{28}$$

说明 2 对于推广的特征值问题$Ax=\lambda Bx$来说，如果Rayleigh商之分母由$x^T x$改成$x^T Bx$，则所有上述原则将均仍有效。利用代换$x=Sz$，这里我们选矩阵$B^{-1}A$的特征向量作为S矩阵的列，把$R(x)$简化为：

$$R(x)=\frac{x^TAx}{x^TBx}=\frac{\lambda_1 z_1^2+\cdots+\lambda_n z_n^2}{z_1^2+\cdots+z_n^2}. \tag{29}$$

这恰是本章（17）式中A和B两矩阵同时对角化的情况，这里两个二次型均变成了完全平方和的形式，且$\lambda_1=\min R(x)$，而$\lambda_n=\max R(x)$。对于振荡系统中的不相等的质量来说，强制其一质量于平衡位置，将使最低频率升高，而使最高频率降低。

练习6.4.12 在（28）式中，哪一个特选的j维子空间为给出最小点者？换言之，在哪个子空间S_j中$R(x)$的最大值等于λ_j？

练习6.4.13 极小极大原理（28）式，可用约束条件之术语写出，而不用子空间术语：

$$\lambda_j=\min_{z_1,\cdots,z_{n-j}}\left(\max_{x^Tz_1=0,\cdots,x^Tz_{n-j}=0} R(x)\right).$$

各向量z与各子空间S_j间的联系如何？

练习6.4.14 求证$Ax=\lambda Bx$之最小特征值λ_1不会大于矩阵A和B对角元的比值a_{11}/b_{11}。

练习6.4.15 （难题）求证，如果对称矩阵A的最后一行和列去掉后，则所余子阵的特征值μ_i满足

$$\lambda_1\leqslant\mu_1\leqslant\lambda_2\leqslant\mu_2\leqslant\cdots\leqslant\mu_{n-1}\leqslant\lambda_n. \tag{30}$$

记住，舍去最后一行和列，相应于单一的约束条件：向量x的最后一个分量为$x_n=0$，故x正交于$z=(0,\cdots,0,1)$。由极小极大原理导出不等式$\mu_j\geqslant\lambda_j$，而由极大极小原理导出$\mu_j\leqslant\lambda_{j+1}$。

§6.5 Rayleigh-Ritz原理及有限元法

前一节包括有两个主要思想：

(i)解方程组$Ax=b$等价于极小化二次型$P(x)=\frac{1}{2}x^TAx-b^Tx$。

(ii)解$Ax=\lambda_1x$等价于极小化瑞利商$R(x)=x^TAx/x^Tx$。

现在，让我们来讲一讲如何应用这些思想的问题。

此问题的历史相当悠久，因为上述等价情况早在一个多世纪以前就已被人们所知。这些极小化方法，曾被用来粗略地近似求解诸如薄板振动和原子的稳定状态（特征值和特征函数）等一些经典的工程学以及物理学问题。从某种意义上讲，这些近似法之所以粗略，乃是由于当时的研究人员仅有的一些如铅笔、纸张与一只小小的计算机械等一类工具的缘故。当然，数学原理是存在的，但它们却无法付诸实施。

显然，后来数字计算机的问世，预示着一场革命的到来，但是，这场革命的第一步，便是舍弃最小原理，因为这些原理太陈旧，计算太缓慢。从而有限差分法脱颖而出，因为它极易使微分方程离散化。在1.6节中，我们已经见过这种方法，那里，每一个导数都被一个差商所取代。其物理范围被格子或"网眼"所覆盖，在每个网眼结点存在着一个诸如$-u_{j+1}+2u_j-u_{j-1}=h^2f_j$一类的方程。从数学上讲，此问题被表示成$Au=f$形式的方程组——本世纪50年代一些计算数学工作者曾全力以赴地从事开发庞大的以及稀疏的方程组快速求解方法的工作。

当时，我们未完全意识到的是，对于现实的工程问题，如求飞机结点上之张力，人脑壳的固有频率等，甚至有限差分法也会变得异常复杂起来。真正的困难并非在于求解方程，而在于建立这些方程。对于非规则区域，我们需要非规则的网，由三角形、四边形或四面体拼凑成的网，此外，我们尚需要系统化的逼近相应物理定律的方法。换句话说，计算机不仅应帮助人们求解数字问题，而且应帮助明确表达出这样的问题。

读者可以猜到发生了什么事情。旧的方法又回来了，但却有了新的思想和新的名称。新的名称即为有限元法，而新的思想则在于构成断续逼近方程，求解并显示结果等方面，使人们可能在更大程度上运用计算机之威力，这是任何其它计算方法所不能比拟的*)。

* 请原谅我这种崇拜，我知道这种方法可能并非不朽之作。

主旨在于保持数学基本思想的简明性，而其应用则可很复杂。这些应用的重点已经从飞机的设计转移到了核反应堆的安全问题上。写此书时，正在进行着有关此法扩展应用到液体动力学方面的激烈争论。然而，对于如此规模的问题来说，无可争议的一点是其成本，到目前为止的化费，10亿美元恐怕是一个保守的估计。我希望一些读者会有足够的兴趣，足够的能力去掌握有限元法并将有所收益。

为了讲解这种方法，我们从经典的Rayleigh-Ritz原理开始，然后再介绍有限元的新概念。这里，我们涉及的微分方程 $-u''=f(x)$，边界条件 $u(0)=u(1)=0$，仍和早期的有限差分法所研究的相同。勿庸置疑，这是一个"无限维"的问题，其中向量 b 被函数 f 所取代，矩阵 A 则被算子 $-d^2/dx^2$ 所取代。但是，我们可以通过类比的方法写下需要求其最小值的二次型。将其内积代之以积分，得：

$$P(v)=\frac{1}{2}v^TAv-v^Tb=\frac{1}{2}\int_0^1 v(x)(-v''(x))dx$$
$$-\int_0^1 v(x)f(x)dx. \tag{31}$$

此式应该在所有满足边界条件的函数 v 上进行极小化，且给出极小值的函数将是原题的解 u。微分方程已经转化成了极小化问题，我们剩下的任务只是对 $P(v)$ 之一项进行分部积分：

$$\int_0^1 v(-v'')dx=\int_0^1(v')^2dx-[vv']_{x=0}^{x=1},$$

因

$$[vv']_{x=0}^{x=1}=0,\ 故\ P(v)=\frac{1}{2}\int_0^1(v')^2dx$$
$$-\int_0^1 vfdx.$$

现在二次项$\int (v')^2dx$为对称的，类似于x^TAx，同时也是正的，因此有极小点是被保证了的。

我们如何求得此极小值呢？其精确计算等价于精确解出微分方程，这个问题是无限维的。只选 n 个试验函数，$v=V_1$，$v=V_2$，…，$v=V_n$，Rayleigh-Ritz原理就是利用这些试验函数，把此问题置换成一个 n 维问题。它容许所有线性组合$V=y_1V_1(x)+\cdots+y_nV_n(x)$，并能计算出使$P(V)$ 极小化之个别组合U。让我们再重复一下上述内容：中心思想在于在子空间中进行极小化，而不在所有可能的v上，给出极小值的函数是U而不是u。我们希望这两者是接近的。

以V取代v后，该二次型就演变成.

$$P(V)=\frac{1}{2}\int_0^1(y_1V_1'+\cdots+y_nV_n')^2dx-$$

$$\int_0^1(y_1V_1+\cdots+y_nV_n)fdx.$$

记住，这些函数V是预先选定的，所不知的是它们的权y_1，y_2，…，y_n。如果我们用这些权组成一个向量y，那末$P(V)$就将和我们所熟悉的二次型完全一致：

$$P(V)=\frac{1}{2}y^TAy-y^Tb, \tag{32}$$

这里$A_{ij}=\int V_i'V_j'dx$为y_iy_j的系数，$b_j=\int V_jfdx$为y_j的系数。我们当然可以求出$\frac{1}{2}y^TAy-y^Tb$之极小值，这等价于解方程组$Ay=b$。因此，Rayleigh-Ritz法之步骤是：(i)选试验函数V_j；(ii)计算出系数 A_{ij}和b_j；(iii) 解方程组 $Ay=b$；(iv) 给出$U=y_1V^1+\cdots+y_nV_n$之近似解。

一切都取决于步骤(i)。除非函数V_j异常简单，其它几步实际上是做不到的。此外，如V_j的任何组合都不接近于真实解 u，那么，后面几个步骤是无用的。问题在于把可计算性和精确性两者结

合起来。使有限元法获得成功的关键思想在于采用了分段多项式作为试验函数V。

最简单和应用最广泛的是分段线性函数。首先，我们把结点安置在$x_1=h$，$x_2=2h$，…，$x_n=nh$之各点上，这恰与有限差分方法一致。边界条件要求，在端点$x_0=0$和$x_{n+1}=1$上，每个函数V都为零。这时V_j为"顶函数"，在结点x_j上，它等于1，而在所有其它结点上均为0（图6.6a）。该函数集中在结点附近的一个小小的区间内，而在其它任何地方均等于0。事实上任何组合$y_1V_1+\cdots+y_nV_n$在同编号的结点上都应有y_j值，因为在此结点上，其它函数V均为0，于是此组合的图形较容易给出（图6.6b）

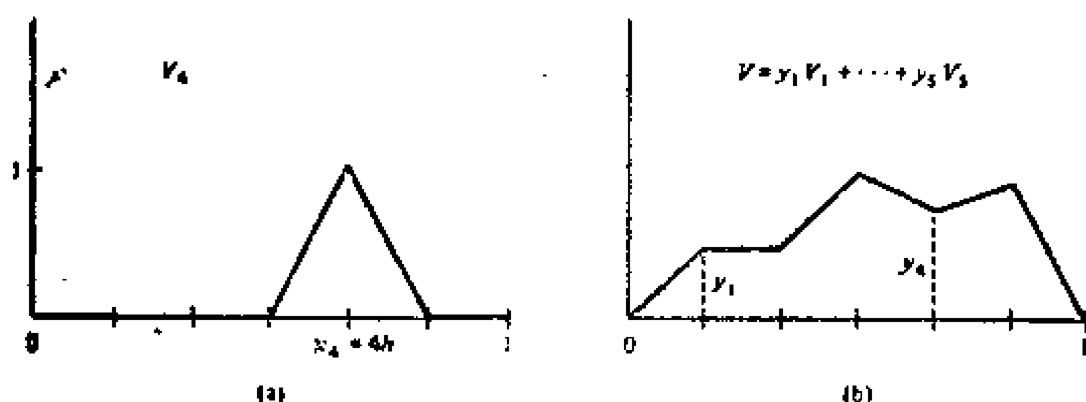


图 6.6 顶函数及其线性组合

步骤(i)就此结束。下一步我们在"硬矩阵"A中求出系数$A_{ij}=\int V_i'V_j'dx$。函数V_j的斜度V_j'在x_j左侧的小区间内等于$1/h$，而在右侧等于$-1/h$。V_i'在其结点x_i附近亦如此，且如果这些"双重区间"对于函数V_i'和V_j'来说不重叠的话，那么乘积$V_i'V_j'$恒等于0。仅仅当

$$i=j \qquad 且\int v_i'v_j'dx=\int\left(\frac{1}{h}\right)^2dx+\int\left(-\frac{1}{h}\right)^2dx$$

$$=\frac{2}{h},$$

或　$i = j \pm 1$　且 $\int v_i' v_j' dx = \int \left(\frac{\ }{h} \right) \left(\frac{\ }{h} \right) dx$

$$= -\frac{1}{h}$$

时，它们才重叠。因此，该刚度矩阵实际上为三对角线型：

$$A = \frac{1}{h} \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & -1 & 2 & -1 & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

这看起来和有限差分法的矩阵A完全一样，于是导致了多次有关此两方法关系之争论。更复杂的有限元——更高阶多项式，这些多项式对于常微分方程来说在区间上定义，而对于偏微分方程则在三角形或四边形上定义——也会产生稀疏矩阵A。你可以把有限元法想象成一种在非规则网上建立精确差分方程的单一化的途径，结果使有限元法落入Rayleigh-Ritz法与有限差分法的“交接面”上。此法的精华在于这些分段多项式的简明性，在每一个子区间，它们的斜度很容易求得也容易对其进行积分。

右侧的分量b_j完全是新遇到的，在有限差分方法中，这组仅仅是f在结点x_j上的值，而现在，它们则为f在该点附近的平均值：$b_j = \int v_j f dx$，然后在步骤(iii)，我们解三对角方程组$Ay = b$，该方程组的解即给出使$P(V)$极小化的特殊试验函数$U = y_1 V_1 + \cdots + y_n V_n$的系数。最后，用折线把所有这些$y_j$之顶点连接起来，我们便得到近似解$U$的图形。

现在让我们指出：所研究的此特定问题所特有的一个性质：U不仅仅接近于真实解u，而且在网的结点处恰恰等于u。换言之，U为u的线性内插式。对于更加复杂的方程来说，这是一个过高的期望，此结果不会出现。但误差$U - u$，甚至在粗糙的网上也是很小的。相应的收敛理论，在作者 George Fix合著的《有限元法分

析》(《An Analysis of the Finite Element Method》 Prentice-Hall, Englewood Clitts, New Jersey, 1973)一书中有所论述。那里我们也讨论了偏微分方程，有限元法对偏微分方程来说，亦保持其有效性。

练习6.5.1 对于一不变的源项(source term) $f=1$ 来说，$-u''=f$ 之解为抛物线 $u=(x-x^2)/2$。计算各系数 $b_j=\int V_j f$，并证明各确切值 $y_j=u(x_j)$ 满足有限元方程组 $Ay=b$。

练习6.5.2 当 $A=I$ 时，二次型为 $P(y)=\frac{1}{2}y^Ty-y^Tb$，并在向量 $y=b$ 上达到其最小值。求证 $P(y)-P(b)=\frac{1}{2}\|y-b\|^2$，并根据此等式解释，为什么在试验函数的子空间使 $P(y)$ 极小化的向量亦为最接近 b 的向量。Rayleigh-Ritz原理自动向试验函数子空间投射出真实解的投影。

特征值问题

Rayleigh-Ritz的思想——在有限维函数族 V 上实现极小化，以取代在所有可容许的函数 v 上的极小化——对特征值问题有用，也正如对稳态方程有用一样。这时被极小化的正是Rayleigh商。其确切极小值为基频 λ_1，当我们把试验函数类由所有函数 V 限制到较小范围时，函数 v 其近似极小值 Λ_1 将有所增长。此外，仅当函数 V_j 容易计算时，离散问题才是可以处理的，瑞利-里兹原理也才可以应用。因此，近20年来所采取的步骤是完全自然的，不可避免的：把新的有限元思想运用到特征值问题的变分形式中去。

最典型的是下面这个最简单的例子：

$$-u''=\lambda u,\ u(0)=u(1)=0\ . \tag{33}$$

其第一特征向量为 $u=\sin\pi x$，特征值为 $\lambda_1=\pi^2$。此特征值和函数满足方程(33)，且给出相应瑞利商之最小值。

$$R(v)=\frac{v^T[-d^2/dx^2]v}{v^Tv}=\frac{\int_0^1 v(-v'')}{\int_0^1 v^2}$$

$$=\frac{\int_0^1 (v')^2}{\int_0^1 v^2}$$

从物理学的角度看，这是势能与动能之比，且在特征向量上它们是平衡的。在通常情况下，此特征向量是未知的。为近似求出此向量，我们只选取$V=y_1V_1+\cdots+y_nV_n$。结果，我们得

$$R(V)=\frac{\int_0^1 (y_1V_1'+\cdots+y_nV_n')^2}{\int_0^1 (y_1V_1+\cdots+y_nV_n)^2}=\frac{y^TAy}{y^TBy}$$

现在我们面临使y^TAy/y^TBy极小化的问题。如果B为单位矩阵，那末，这将转化为标准的特征值问题$Ay=\lambda y$。但这里的矩阵B将是三对角线的，且正是这种情况产生了推广的特征值问题。比式$R(V)$的最小值Λ_1将是$Ay=\lambda By$的最小特征值，而相应的特征向量y将给出原问题特征函数的近似形式：$U=y_1V_1+\cdots+y_nV_n$。

如在静态问题中一样，此法可被总结成四个步骤：(i) 选择函数V_j；(ii)计算矩阵A和B；(iii)解$Ay=\lambda By$；(iv)选择Λ_1，给出相应函数U。我不知道，为什么这就值10亿美元。

练习6.5.3 对分段线性函数V_1和V_2来说，对应于结点$x=h=\frac{1}{3}$和$x=2h=\frac{2}{3}$，计算二阶矩阵B。证明此离散特征值问题与练习6.3.6中问题的同一性，并把Λ_1和真实特征值$\lambda_1=\pi^2$作一比较。

练习6.5.4 在有限元法中说明为什么极小极大原理也保证$\Lambda_2\geqslant\lambda_2$。

第七章　矩阵的计算

§7.1　引　　言

本书的目的在于研究矩阵理论的某些应用。这里所阐述的理论，与抽象线性代数的标准教程相比，没有作根本性的改变，本科目的最大优点之一便是，这些理论对于应用来说，确实非常重要。从一种新的观点出发，改变了研究的重心。现在，高斯消元法不只是求行空间基的一种方法，而克拉姆——施米特过程也不单是证明每一个子空间都有正交基的一种方法，而更进一步，我们确实需要这些算法，并且需要对它们功能的一种方便的描述，如 $A=LU$ 或 $A=QR$。

在这一方面，本章将要作一些进一步的探讨。以本人之见，这些进一步的工作实属计算之必需，并非锦上添花之举。但是，我不知道，是否应当对此表示歉意，这些工作似乎是很肤浅的。其实不然，它们所涉及到的是本学科中最古老的也是最基本的问题 $Ax=b$ 和 $Ax=\lambda x$。但是，实际上这些问题都是现代数学家们所构思出来的。在数值分析中，也有某种适者生存的问题。下面我们想介绍几个到目前为止仍然行之有效的思想。它们可分为三组。

1．方程组 $Ax=b$ 的解法。高斯消元法是一个很完善的算法。如果个别问题具有某些特殊性质——几乎每个问题都有——或许是例外的。我们将集中讨论矩阵 A 的稀疏性质，此时，它的大部分元素都为零。同时也集中讨论解方程组 $Ax=b$ 的迭代法的发展，而不是直接法。迭代方法是"自校正"的，这种校正过程多次重复。虽然利用迭代方法永远得不到精确答案，但我们的目的是要比消元法更快地得到近似解。在某些情况下，这一点是可以做到的。如果

利用某阶分解，在许多其它情况下，消元法更可靠更迅速。这种竞争还远未见分晓。我们的第一个目的就是建立保证收敛到真实解$A^{-1}b$的条件，此条件将制约敛速。在§7.4中，我们将这些条件应用于逐次超松弛法以及其它的迭代方法之中。

2. 问题$Ax=\lambda x$的解法。特征值问题是数值分析中相当成功的例子之一。它定义清楚，意义显然。不过，不久之前却无人晓得如何求得其解。曾经有人提出过几十种算法，当然，还不能把它们排列成一个从最好到最坏的优劣顺序表。一切取决于矩阵A的性质及其大小，以及取决于我们想要计算的特征值的个数。换句话说，如果对于特征值的情况一无所知，就向计算中心去索取计算特征值的子程序那是危险的（当然，我希望你们不必去检验这些程序的每一个FORTRAN语句）。Wilkinson和Reinsch的名著*阐述了一系列算法，我们从中选择了两三个，这些算法几乎把前面所有的算法都取而代之：QR算法，幂法以及将对称矩阵化为三角形的变换。

前两者为迭代法，而后者则为直接法，此法有限次运算即可实现，但最终不给出特征值，而仅给出应用迭代法的最简化形式的矩阵。

3. 矩阵的条件数。§7.2试图对灵敏度或者“弱解”做一度量：如果A和b稍有改变，那么这对解$x=A^{-1}b$会有多大影响？在研究这个问题之前，我们想指出一个障碍（这个障碍容易避免）。应当有一种测量矩阵A的变化量δA并且能够估计矩阵A本身的大小的方法。向量的长度已有定义，现在我们需要矩阵范数。此后，条件数以及随之而来的矩阵的灵敏度将从矩阵A和A^{-1}的范数直接得来。

---

* J. M. Wilkinson and C. Reinsch《Handbook for Automatic Computation, Linear Algebra》Springer, New York and Berlin, 1971

§7.2 矩阵的范数和条件数

误差和错误是很不相同的两件事。误差为小小的错误，甚至连很高明的数学家或者计算机在其工作中也是避免不了误差的。而错误要严重得多，其大小至少要比前者大一个数量级。

当计算机对某数值之第九位有效数字进行四舍五入时，这便是一个误差，但当某问题异常灵敏，以致这样的四舍五入误差完全改变其解时，那末，几乎可以肯定，有地方出现了错误。我们在本节中将对误差的影响进行分析，以达到避免错误的目的。

实际上，我们继续第一章中开始的关于矩阵

$$A=\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & 1.0001\end{bmatrix} \text{ 和 } A'=\begin{bmatrix}0.0001 & 1\\ 1 & 1\end{bmatrix}$$

的讨论。

我们说过，A'为良条件矩阵，对四舍五入的误差并不特别敏感（除非Gauss消元法用得很笨拙，这时矩阵即变得异常容易破坏）。把0.0001作为第一主元将是一个大的错误，因此，我们必须通过矩阵 A' 的行交换的方法来选择较大的更为可靠的主元。当在消元算法中安排有“部分选元”，以使计算机自动寻找最大主元时，对四舍五入误差的自然障碍，就不再构成威胁了。

我们如何度量这个自然障碍？如何决定某矩阵是条件优者还是条件劣者？如果 b 或 A 中发生了小小的变化，这将在解 x 中引起多么大的变化呢？

我们从右侧的变化开始，它从 b 变到 $b+\delta b$。此误差可能来自试验数据或者来自四舍五入，我们假定δb很小，但其方向我们不控制。相应解从 x 变到 $x+\delta x$：

$$A(x+\delta x)=b+\delta b, \text{ 相减后得 } A(\delta x)=\delta b。$$

这是最简单的情况。我们研究所有的扰动δb并对扰动之结果 $\delta x=A^{-1}\delta b$做出估价。当A^{-1}相当大时（A几乎是奇异的）解的变化将很

大。而当向量δb指向被矩阵A^{-1}放大最甚的方向时，解的变化将特别大。

首先让我们假定，矩阵A是对称的，且其特征值均为正：$0<\lambda_1\leqslant\lambda_2\leqslant\cdots\leqslant\lambda_n$。任一向量$\delta b$都是相应单位特征向量$x_1$，…，$x_n$之组合，且最坏的扰动乃是第一特征向量$x_1$方向上的误差：

如果$\delta b=\varepsilon x_1$，则$\delta x=\delta b/\lambda_1$。　　　　（1）

向量大小的误差$\|\delta b\|$被因子$1/\lambda_1$所放大，而此因子恰为矩阵A^{-1}的最大特征值。当λ_1接近零时，此放大作用最甚，故近于奇异的矩阵是最灵敏的。

此种灵敏度的度量法只有一个然而却是严重的缺陷。假如我们把矩阵A的每一元素均乘以1000，那么λ_1将被放大至1000倍，看起来，矩阵的奇异程度就要小多了。这伤害了我们的正义感因为如此简单的标度变化并不能使病态矩阵成为优条件者。是的，δx将被缩小至原来的1/1000，但解$x=A^{-1}b$亦将被缩小至同样的程度，于是，相对误差$\|\delta x\|/\|x\|$将依然如故。分母中的因子$\|x\|$会使问题正常化，使之不受标度无谓变化的影响。同时，也有相应的δb的正常化问题。我们的任务是要对相对变化$\|\delta b\|/\|b\|$和相对误差$\|\delta x\|/\|x\|$做一比较。

最坏的情况是当分子$\|\delta x\|$很大（即扰动与第一特征向量x_1的方向一致），而分母$\|x\|$很小时的情况。无扰动解x与无扰动之b相比较，应该是可能情况下的最小者。这就是说，原问题$Ax=b$之解应当在另一个极端方向，即在最后一个特征向量x_n之方向：

如果　$b=x_n$，则$x=A^{-1}b=b/\lambda_n$。　　　　（2）

正是这样一种组合，$b=x_n$且$\delta b=\varepsilon x_1$，使得相对误差在可能情况下最大。这些就是下述不等式之极值情况。

7A　对于正定矩阵来说，其解$x=A^{-1}b$和误差$\delta x=A^{-1}\delta b$永远满足不等式

$$\|x\|\geqslant\frac{\|b\|}{\lambda_n}\quad 和\quad \|\delta x\|\leqslant\frac{\|\delta b\|}{\lambda_1}. \tag{3}$$

因此，相对误差由不等式

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|}\leqslant\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\frac{\|\delta b\|}{\|b\|} \tag{4}$$

来限定。

数量 $c=\frac{\lambda_n}{\lambda_1}=\frac{\lambda\max}{\lambda\min}$ 称为矩阵 A 之条件数。

例 1 矩阵

$$A=\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & 1.0001\end{bmatrix}$$

的特征值近似为 $\lambda_1=10^{-4}/2$，$\lambda_2=2$。因此，其条件数约为 $c=4\cdot10^4$，我们应当预料到当初始数据有某些很微小的变化时，其解会有很大的改变。在前面我们实际上把方程 $Ax=b$ 和 $Ax'=b'$ 作了比较：

$$\begin{cases}u+v=2\\ u+1.0001v=2.0001\end{cases}\text{且}$$

$$\begin{cases}u'+v'=2\\ u'+1.0001v'=2.0002\end{cases}$$

则解由 $x=(1,1)$ 变到了 $x'=(0,2)$：

$$\frac{\|x'-x\|}{\|x\|}=\frac{\|(-1,1)\|}{\|(1,1)\|}=1,$$

$$\frac{\|b'-b\|}{\|b\|}=\frac{\|(0,0.0001)\|}{\|(2,2.0001)\|}\sim\frac{10^{-4}}{2\sqrt{2}}.$$

相对放大倍数为 $\|\delta x\|/\|x\|\sim2\sqrt{2}\cdot10^4\|\delta b\|/\|b\|$。这里没有对扰动作任何特殊的选择——我们的 δb 和特征向量 x_1 间构成了一个 45° 角，这正是我们的因子与最坏的放大倍数 $c=4.10^4$ 间相差 $\sqrt{2}$ 倍的原因——但我们仍然发现了解的巨大变化。

请注意，条件数 c 并不直接受矩阵大小之影响；如果 $A=I$，或

者甚至$A=I/10$，则条件数 $c=\lambda max/\lambda min=1$。相比之下，行列式则是病态条件的一种很好的度量。因为它不仅受标度的影响，而且也受阶数 n 的影响；如果$A=I/10$，那么A的行列式等于10^{-n}。实际上，这个"近于奇异"的矩阵为可能情况下的条件最优者。

例 2 我们来讨论 n 阶有限差分矩阵

$$A=\begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & -1 & 2 & \cdot & \\ & & \cdot & \cdot & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix}.$$

其最大特征值约为$\lambda_n=4$，而其最小特征值约为$\lambda_1=\pi^2/n^2$。因此，其条件数近似为 $c=\frac{1}{2}n^2$ 这里对阶数 n 的依赖性是真实存在的。通过增加未知数个数的办法，我们对$-u''=f$ 近似得越好，那末求近似解就越困难。这不但费时较长，而且易受四舍五入的影响。从某一转折点开始，n 的增加实际上将使答案更坏。

对工程技术人员来说，很幸运，这一转折点出现在精度足够好的地方。用单精度进行运算，典型的计算机之四舍五入误差为10^{-9}数量级。如果在取未知数的个数 $n=100$ 的情况下求近似解的话，则 $c=5000$，那末这样一个误差最多可能增长至10^{-5}数量级——这仍然比任何通常的计量来得精确。但是如果有 10000 个未知数，或者对于更高阶的方程，例如$d^4u/dx^4=f(x)$进行有限差分近似时，就会出现麻烦，对于后者条件数增至n^4*。

到目前为止，我们的分析都是针对具有正特征值之对称矩阵进行的。本来，我们可以轻而易举地放弃这个正特征值的前提条件，而用λ_i之绝对值，此时条件数将变成 $c=\max|\lambda_i|/\min|\lambda_i|$。但为摆脱对称性的假定（当然我们正想这样做），就不得不做重大的改变。对于矩阵

* 已经为试验证实的通常的母指定则为：高斯消元法中，在存在四舍五入的情况下，计算机可能丢失$\log c$个十进制位。

$$A=\begin{bmatrix}1 & 100\\ 0 & 1\end{bmatrix} \text{ 和 } A^{-1}=\begin{bmatrix}1 & -100\\ 0 & 1\end{bmatrix} \tag{5}$$

这一点是很容易看出的。所有特征值均等于 1，但如果说，x 之相对变化为 b 之相对变化所限制，那当然是不对的，条件数并非由 $\lambda max/\lambda min=1$ 所给定。试比较下面两个解

当 $b=\begin{bmatrix}100\\ 1\end{bmatrix}$时，$x=\begin{bmatrix}0\\ 1\end{bmatrix}$；

当 $b'=\begin{bmatrix}100\\ 0\end{bmatrix}$时 $x'=\begin{bmatrix}100\\ 0\end{bmatrix}$。

b 的 1 %的变化引起了 x 一百倍的变化，放大倍数为100^2。因为 c 代表此放大作用的上界，所以它至少应为10000。在这些矩阵中，我们所遇到的困难在于，A 中对角线外的某一大的元素就意味着在 A^{-1}中有一同样大小的元素，这与我们的直觉——随着A的增大，A^{-1}应该减小——是相矛盾的。

为给条件数一个适当的定义，我们不得不回顾一下方程(3)。λ_i的所以进入该方程的理由在于，它是 $\|b\|$ 对 $\|x\|$ 之所有可能的比值中的最大者。我们曾试图使 x 小而$b=Ax$大。(极值情况发生在特征向量x_i上，那里Ax对 x 之比恰为λ_i。）当A不再是对称矩阵的情况下，唯一不同点在于，$\|Ax\|/\|x\|$ 的最大值可能出现在某个不是特征向量的向量上。这个最大值仍然是矩阵A的大小的一个很好的度量；它被命名为矩阵的范数，并用 $\|A\|$ 表示。

7B 矩阵A的范数为关系式

$$\|A\|=\max_{x\neq 0}\frac{\|Ax\|}{\|x\|} \tag{6}$$

所确定的数。换言之，$\|A\|$ 限制矩阵的"放大作用"，对所有向量 x 有

$$\|Ax\|\leqslant\|A\|\,\|x\|. \tag{7}$$

并且至少对于一个非 0 向量 x 来说，等式是成立的。

等式(5)中，矩阵A和A^{-1}的范数介于100与101之间。稍后我

们即可将其确切地计算出来，但我们想首先确定范数和条件数间的联系。因为 $b=Ax$，$\delta x=A^{-1}\delta b$，故从定义(7)中，我们立即得知

$$\|b\|\leqslant\|A\|\ \|x\| \text{ 与 } \|\delta x\|\leqslant\|A^{-1}\|\ \|\delta b\|. \tag{8}$$

当 A 为非对称矩阵时，这是对(3)的一个明显的替换，在对称的情况下，$\|A\|$ 正是 λ_n，$\|A^{-1}\|$ 正是 $1/\lambda_1$。因此，对于 λ_n/λ_1 的明显的替换应是乘积 $\|A\|\ \|A^{-1}\|$。

7C 矩阵 A 的条件数为 $c=\|A\|\ \|A^{-1}\|$，且相对误差满足不等式

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|}\leqslant c\frac{\|\delta b\|}{\|b\|}. \tag{9}$$

如果我们对矩阵 A 而不是对右侧 b 给以扰动，则

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x+\delta x\|}\leqslant c\frac{\|\delta A\|}{\|A\|}. \tag{10}$$

不等式(9)对于每一个 b 和每一个 δb 都成立，且恰为(8)中两不等式的乘积。值得注意的是，当矩阵本身受到扰动时，同一个条件数出现于(10)中。如果 $Ax=b$，且 $(A+\delta A)(x+\delta x)=b$，则两式相减后，我们得

$$A\delta x+\delta A(x+\delta x)=0 \text{ 或 } \delta x=-A^{-1}(\delta A)(x+\delta x).$$

某向量乘以 δA 所得的放大倍数不会大于范数 $\|\delta A\|$。而乘以 A^{-1}，则放大作用不大于 $\|A^{-1}\|$ 倍。因此

$$\|\delta x\|\leqslant\|A^{-1}\|\ \|\delta A\|\ \|x+\delta x\|,$$

或

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x+\delta x\|}\leqslant\|A^{-1}\|\ \|\delta A\|=c\frac{\|\delta A\|}{\|A\|}.$$

这些不等式意味着，四舍五入误差来自两个方面：第一，问题的自然灵敏度，以 c 度量；第二，在求解过程中所发生的实际误差 δb 或 δA。这就是维尔克逊误差分析的基础。因为消元算法实际产生的是近似因子 L' 和 U'，所以它解的是有误差的矩阵方程 $A+\delta A=$

$L'U'$，而不是原矩阵$A=LU$。Wilkinson逊证明了，部分选主元法是可以保证控制住δA。(请参阅其《代数过程中之四舍五入误差》一书：《Rounding Errors in Algebraic Processes》)所以四舍五入误差的全部便由条件数 c 来承担。

练习7.2.1 如果A为正交矩阵Q，求证$\|Q\|=1$，且$c(Q)=1$。正交矩阵(及其倍数形式aQ)是唯一具有完善条件的矩阵。

练习7.2.2 哪一个"有名的"不等式给出$\|(A+B)x\|\leqslant\|Ax\|+\|Bx\|$，为什么从(6)中可以得出$\|A+B\|\leqslant\|A\|+\|B\|$？

练习7.2.3 说明，为什么$\|ABx\|\leqslant\|A\|\|B\|\|x\|$，并从(6)中导出$\|AB\|\leqslant\|A\|\|B\|$。证明这蕴含着$c(AB)\leqslant c(A)\cdot c(B)$。

练习7.2.4 对于正定矩阵$A=\begin{bmatrix}2 & -1\\ -1 & 2\end{bmatrix}$，计算$\|A^{-1}\|=1/\lambda_1$，$\|A\|=\lambda_2$以及$c(A)=\lambda_2/\lambda_1$。求出右侧 b 和扰动δb以使其解的误差为可能情况下的最坏者，即$\|\delta x\|/\|x\|=c\|\delta b\|/\|b\|$。

练习7.2.5 如果λ为矩阵A的任一特征值，$Ax=\lambda x$，求证$|\lambda|\leqslant\|A\|$。

范数公式

矩阵A的范数为任一向量(特征向量或非特征向量)乘以该矩阵之后所得最大变化量的度量：$\|A\|=\max(\|Ax\|/\|x\|)$。单位矩阵的范数为1。为计算一般情况下之此"放大因子"，我们把等式两端取平方：

$$\|A\|^2=\max\frac{\|Ax\|^2}{\|x\|^2}=\max\frac{x^TA^TAx}{x^Tx}\tag{11}$$

所得关系式又把我们带到对称矩阵A^TA及其"Rayleigh商"。

7D 矩阵A的范数等于矩阵A^TA的最大特征值的平方根：

$\|A\|^2=\lambda\max(A^TA)$。如果$A$为对称矩阵，那么$A^TA=A^2$，因此范数等于最大的特征值：$\|A\|=\max|\lambda_i|$。在每一种情况下，被放大最甚者乃是矩阵$A^TA$的相应特征向量：

$$\frac{x^TA^TAx}{x^Tx}=\frac{x^T(\lambda\max x)}{x^Tx}=\lambda\max=\|A\|^2.$$

注 1　矩阵A的范数和条件数，在实际问题中并不真正计算出来，而只是估算出来。我们没有时间为求$\lambda\max(A^TA)$而解特征值问题。

注 2　条件数说明，正规方程$A^TAx=A^Tb$用最小二乘法何以很难求解，条件数$c(A^TA)$是$c(A)$的平方。构成A^TA可把一个好问题变坏，除很少问题之外，应用Cramer-Schmidt过程或奇异值分解法$A=Q_1\Sigma Q_2^T$要好得多。

注 3　对角阵Σ中的诸元素σ_i为矩阵A的奇异值，且从结构上看，它们的平方即为矩阵A^TA的特征值。因此，范数的另一公式为$\|A\|=\sigma\max$。在关系式$\|Ax\|=\|Q_1\Sigma Q_2^Tx\|$中，正交矩阵$Q_1$和$Q_2$并不改变向量的长度，因而最大的放大因子等于最大之$\sigma$。

注 4　四舍五入误差不仅在解$Ax=b$时会发生，而且在解$Ax=\lambda x$时也会发生。这就提出了一个新的问题：什么是“特征值问题的条件数”？认为这个答案显而易见那便错了。这不是矩阵A本身的条件数，而是对角化矩阵S的条件数，它度量特征值的灵敏度。如果μ是矩阵$A+E$的特征值，则它与矩阵A任一特征值间的距离为

$$|\mu-\lambda|\leqslant\|S\|\ \|S^{-1}\|\ \|E\|=c(S)\|E\| \tag{12}$$

如果S为正交矩阵Q，则特征值问题条件完美：$c(Q)=1$，且特征值的变化量$\mu-\lambda$不大于矩阵A的变化量E。只要A的各特征向量构成正交系统，它们为矩阵S的列，这一点就会发生。因此，最好的情况是A为对称矩阵，或更一般地讲，$AA^T=A^TA$。此时A为一正规阵，其对角化阵S为一正交矩阵Q（见§5.6），其特征值条件完美。你们可以看到S存在于每一个单独特征值的扰动公式中：如果x_k为S的第k列，y_k为S^{-1}的第k行，则

$$\mu_k-\lambda_k=y_kEx_k+\|E\|^2\text{数量级的各项。} \tag{13}$$

在实践中，y_kEx_k能足够真实地估计出特征值的变化。每一个好算法的思想在于使误差矩阵E尽可能地小，这一点通常是通过在迭代法的每一步都坚持要正交矩阵的办法来达到的，下一节中QR算法正是这样做的。

练习7.2.6 求(5)式两矩阵的精确范数。

练习7.2.7 对于练习5.6.3中之矩阵A，试比较矩阵A^TA和AA^T之特征值，求证$\|A\|=\|A^T\|$。

练习7.2.8 对于正定矩阵A，Cholesky分解式为$A=LDL^T=W^TW$，这里$W=\sqrt{D}L^T$。直接由7D证明矩阵W之条件数等于矩阵A的条件数的平方根。由此得出结论，Gauss算法对于正定矩阵无需进行行交换，条件不会变坏，因为$c(A)=c(W^T)c(W)$。

练习7.2.9 通过找出一个关于不等式$\lambda\max(A+B)\leqslant\lambda\max(A)+\lambda\max(B)$和$\lambda\max(AB)\leqslant\lambda\max(A)\lambda\max(B)$的二阶反例，以此证明，最大特征值不是令人满意的范数。

练习7.2.10 设$\|x\|$由欧儿里得长度$\sqrt{x_1^2+\cdots+x_n^2}$变成了"最大范数"或"$L_\infty$范数"：$\|x\|_\infty=\max|x_i|$（例如，$\|(1,-2,1)\|_\infty=2$）。试计算相应的矩阵范数。如果

$$A=\begin{bmatrix}1 & 2\\ 3 & -4\end{bmatrix},$$

$$\|A\|_\infty=\max_{x\neq0}\frac{\|Ax\|_\infty}{\|x\|_\infty}=\max_{x_i=\pm1}\|Ax\|_\infty.$$

§7.3 特征值的计算

求矩阵之特征值，没有好的方法。但却有一些蹩脚的方法，请永远也不要试用。然而有一些思想值得我们借鉴。我们从一个颇为粗糙，然而却很现实的方法——**幂法**谈起。此法的收敛性很容易理解。然后，我们稳步地过渡到一个更加复杂的算法，此法由把对称

矩阵三对角化开始，解得到真正的对角矩阵而告终。其最后一步是通过Cramer-Schmidt过程实现的，而整个方法称为QR算法。

一般的幂法是完全按照差分方程的原理来实现的。首先试选初始向量u_0，然后依次形成向量$u_1=Au_0$，$u_2=Au_1$以及一般情况下的$u_{k+1}=Au_k$。上述每步均为矩阵-向量乘法，k步之后，得$u_k=A^k u_0$，不过矩阵A^k永远不会出现。实际上，最重要的是，以A相乘要容易实现才行——如果矩阵很大，最好将其稀疏——因为收敛到特征向量的过程往往是很慢的。假设A具有一完整系列的特征向量x_1，…，x_n，那么向量u_k将由差分方程之通常公式给出：

$$u_k=c_1\lambda_1^k x_1+\cdots+c_n\lambda_n^k x_n. \tag{14}$$

假设特征值是按顺序编号的，且最大特征值是唯一的，即再没有与其模量相等的其它特征值，λ_n不重复。这样$|\lambda_1|\leqslant\cdots\leqslant|\lambda_{n-1}|<|\lambda_n|$。那么，只要初始猜想$u_0$包含特征向量$x_n$的某一分量，且其系数$c_n\neq 0$，则该分量就会渐渐取得支配地位.

$$\frac{u_k}{\lambda_n^k}=c_1\left(\frac{\lambda_1}{\lambda_n}\right)^k x_1+\cdots+c_{n-1}\left(\frac{\lambda_{n-1}}{\lambda_n}\right)^k x_{n-1}+c_n x_n. \tag{15}$$

向量u_k越来越接近x_n的方向，且收敛因子为比值$r=|\lambda_{n-1}|/|\lambda_n|$。这恰似收敛到某一稳定状态的情形，这种情况对于马尔柯夫过程，我们已经研究过了，差别只不过是现在最大特征值λ_n可能不等于1。实际上，(15)式中的比例因子λ_n^k我们并不知道，而且必须要引入某些比例因子，否则，当$|\lambda_n|>1$或$|\lambda_n|<1$时，u_k会变得很大或很小。通常，在进行下一步之前，我们可以将每一u_k除以其第一分量α_k。引入这样一个简单的比例因子，幂法就变成了$u_{k+1}=Au_k/\alpha_k$的形式，它收敛到向量x_n之倍数值*。

例 （来自加利福尼亚州）人口移动情况之矩阵曾经是$A=\begin{bmatrix}0.9 & 0.2\\ 0.1 & 0.8\end{bmatrix}$，其特征值为1，特征向量为$\begin{bmatrix}0.667\\ 0.333\end{bmatrix}$。

* 这些比例因子也收敛，趋近于λ_n。

$$u_0=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix},\ u_1=\begin{bmatrix}0.9\\0.1\end{bmatrix},\ u_2=\begin{bmatrix}0.83\\0.17\end{bmatrix},$$

$$u_3=\begin{bmatrix}0.781\\0.219\end{bmatrix},\quad u_4=\begin{bmatrix}0.747\\0.253\end{bmatrix}.$$

幂法的严重的局限性。由此例中可以清楚地看出：如果 r 接近于 1，则收敛过程很缓慢。在很多应用场合 $r>0.9$，这就意味着，为使$(\lambda_2/\lambda_1)^k$降低到原来的1/10，就需要20多次迭代（在我们的例子中，$r=0.7$，收敛过程仍然不快）。当然，如果 $r=1$，这意味着 $|\lambda_{n-1}|=|\lambda_n|$，则可能根本就不收敛。有若干个克服此局限性的途径，我们将讲述其中三个：

（1）**分块幂法**，同时取若干个向量，而非单一的u_k。如果我们开始取 p 个正交向量，将其均乘以 A，然后用Cramer-Schmidt法使之再次正交化（这是此法的唯一步骤）那末，就会把收敛比减小到$r'=|\lambda_{n-p}|/|\lambda_n|$。进而，我们将同时得到 p 个不同特征值及其特征向量之近似。

（2）**逆幂法**用A^{-1}，而不用A。此过程的单一步骤为 $v_{k+1}=A^{-1}v_k$，这意味着，我们对线性方程组$Av_{k+1}=v_k$求解（并保留 L 和 U 因子！）。在这种情况下，如果收敛因子$r''=|\lambda_1|/|\lambda_2|$小于 1，则在理论上保证收敛到最小特征值。在应用中，所需要的往往正是最小特征值，这时人们就自动地会选择逆幂法。

（3）移位逆幂法最好。假设以$A-\alpha I$代替A。则所有特征值λ_i都被移动同样一个量值α，用于逆幂法的收敛因子将变成$r'''=|\lambda_1-\alpha|/|\lambda_2-\alpha|$。因此，如果$\alpha$选择得很近似于$\lambda_1$，则$r'''$将很小，于是收敛过程将大大加速。此法的每一步都在于解方程组$(A-\alpha I)w_{k+1}=w_k$，且式

$$w_k=\frac{c_1x_1}{(\lambda_1-\alpha)^k}+\frac{c_2x_2}{(\lambda_2-\alpha)^k}+\cdots+\frac{c_nx_n}{(\lambda_n-\alpha)^k}$$

满足上述差分方程。如果α接近λ_1，则上式右端第一项之分母

十分接近于零，从而只需一、二步就可使第一项取得完全支配地位。在个别情况下，如果λ_1已用其它算法（例如QR算法）算出，即可取此算得的值为α。标准作法在于将$A-\alpha I$分解成LU*，并用回代法解$Ux_1=(1,\ 1,\ \cdots,\ 1)^T$方程组。

如果λ_1尚未经某独立的算法求得近似值，那末，移位幂法不得不自行选择α，或者（因为在每一步我们都可以根据自己的意愿来改变位移量）可以选择关系式$(A-\alpha_k I)w_{k+1}=w_k$中的$\alpha_k$。最简单的可能性就是只用把每一个$w_k$限制到适当大小的比例因子，但是，尚有其它更好的方法。在对称的情况下，即$A=A^T$，最精确的选择似乎是Rayleigh商

$$\alpha_k=R(u_k)=\frac{u_k^T A u_k}{u_k^T u_k}.$$

我们已经知道，该商在特征向量上有一最小点，在这一点R的诸偏导数等于零，此极小点的图形类似于抛物线的底。因此，特征值的误差$\lambda-\alpha_k$大致等于特征向量误差的平方。收敛因子$r''=|\lambda_1-\alpha_k|/|\lambda_2-\alpha_k|$每一步都在发生变化，实际上$r''$本身也收敛于零。选瑞利商作为位移量时，我们得到$\alpha_k$向$\lambda_1$的立方收敛之最终结果**。

练习7.3.1 对其特征值$\lambda_1=1,\lambda_2=3$的矩阵$A=\begin{bmatrix}2 & -1\\ -1 & 2\end{bmatrix}$，进行三次幂法$u_{k+1}=Au_k$迭代，初始值为$u_0=[1,0]^T$，极限向量$u_\infty$是什么？

练习7.3.2 对于上题的矩阵A，初始值为$u_0=[3,4]^T$，试

---

* 这种做法，可能看起来条件异常恶劣，因为我们可使矩阵$A-\alpha I$非常近于奇异。幸运的是，这里的误差主要集中在矩阵A之特征向量的方向上。因为任一特征向量之倍数仍为一特征向量，故这是我们想计算的唯一方向。

** 线性收敛的意思是，每一步均将误差乘以$r<1$的一个固定的因子；平方收敛意味着每一步，对误差都要进行平方，如解$f(x)=0$之牛顿法$x_{k+1}-x_k=-f(x_k)/f'(x_k)$一样；立方收敛的含义是，每一步误差均进行立方，例如，从10^{-1}到10^{-3}到10^{-9}。

比较下列结果：

(i)三步逆幂法

$$u_{k+1}=A^{-1}u_k=\frac{1}{3}\begin{bmatrix}2 & 1\\ 1 & 2\end{bmatrix}u_k;$$

(ii)一步移位逆幂法 $u_1=(A-\alpha I)^{-1}u_0$，其中 $\alpha=u_0^TAu_0/u_0^Tu_0$。

现在的极限向量u_∞为矩阵A之另一特征向量(1，1)之倍数。

三对角阵和Hessenberg形式

仅仅对于大而又十分稀疏的矩阵，我们才推荐用幂法；当矩阵的大多数元素不为零时，此法不宜应用。因此，我们探讨这样一个问题，有无某种简单的方法在矩阵中得到零元素。这就是下面几小节目的所在。

首先应该指出，在计算相似矩阵$U^{-1}AU$，且其中零元素较矩阵A中为多之后，我们并不主张回到幂法，还有几种深入得多的变式，其中的最佳者似乎是QR算法（移位逆幂法在最后求特征向量时还要用到）。在任何情况下，第一步均在于获得尽可能多的零元素，且用尽可能快的方法来实现这一点。限制速度的唯一的因素在于我们要用酉变换(或正交变换)。这些变换保留对称性和长度。换言之，如果A为对称矩阵，那么$U^{-1}AU$亦将为对称矩阵，且其任一元素均不会变得超然之大。

从A变换到$U^{-1}AU$，至少有两种可能性：或者我们每步产生一个零元素(如Gauss消元一样)，或者我们一次取整个一列。为得出单个的零元素，我们应用平面旋转，正如下面(21)式中所示范的那样就足够了。那里的旋转矩阵具有一个含有$\cos\theta$和$\sin\theta$之二阶子阵块。然后我们可用同样方法来处理对角线下之所有元素，每步选择一个能产生一个零元素的旋转角θ。这便是雅可比法原理。很遗憾，有限次旋转之后，我们并不能使A对角线化，因为前几步所获的零元素，在后续步骤产生新的零元素时行将被破坏。

为保留已经得到的零元素，我们不得不在将矩阵化为几乎近于

三角形式时就适可而止，在主对角线下保留一个非零对角线。这便是所谓 Hessenberg 形式。如果矩阵是对称的，则上三角形部为本矩阵下三角形之镜象，从而矩阵将是三对角阵。

这两种形式，过去均通过在适当平面中进行一系列旋转而得来，但是Householder找到了解决这一问题的新方法。他的思想为 QR法提供了"预备步骤"*。Householder变换，或称为基本反射（elementary reflector）是由下述形式之矩阵实现的。

$$H=I-\frac{2vv^T}{\|v\|^2}.$$

v 往往被规范成一单位向量$u=v/\|v\|$，这时H就变成了$I-2uu^T$形式。在这两种情况下，H为对称且正交的矩阵：

$$H^TH=(I-2uu^T)^T(I-2uu^T)$$
$$=I-4uu^T+4uu^Tuu^T=I.$$

这样，$H=H^T=H^{-1}$。在复的情况下，相应之矩阵 $I-2uu^H$ 既为Hermite型又为酉型。Householder的计划就在于以这些矩阵来产生零元素，且其所以能够成功是基于下述恒等式。

7E 设$z=(1,0,\cdots,0)^T$，$\sigma=\|x\|$，$v=x+\sigma z$。那末$Hx=-\sigma z=(-\sigma,0,\cdots,0)^T$。

证

$$Hx=x-\frac{2vv^Tx}{\|v\|^2}=x-(x+\sigma z)\frac{2(x+\sigma z)^Tx}{(x+\sigma z)^T(x+\sigma z)}$$
$$=x-(x+\sigma z)\quad(\because x^Tx=\sigma^2)$$
$$=-\sigma z. \tag{16}$$

我们立即可以应用此恒等式。我们从A的第一列开始，同时要记住，最终应该得到矩阵A的三对角形式，或Hessenberg 形式$U^{-1}AU$。因此，对角线下只包含有$n-1$个元素：

---

* 如果愿意，你们可以不进行这项预备步骤，而直接过渡到所述的QR算法。只是在实际计算中，才需要首先产生零元素。

$$x=\begin{pmatrix}a_{21}\\a_{31}\\\vdots\\a_{n1}\end{pmatrix},\quad z=\begin{pmatrix}1\\0\\\vdots\\0\end{pmatrix},\quad Hx=\begin{pmatrix}-\sigma\\0\\\vdots\\0\end{pmatrix}. \tag{17}$$

在这一点上Householder矩阵H仅为$n-1$阶，因此，它被置于满阶矩阵U_1之右下角：

$$U_1=\begin{pmatrix}1 & 0\ 0\ 0\ 0\\0 & \\0 & \\0 & H\\0 & \end{pmatrix}=U_1^{-1},\qquad 且$$

$$U_1^{-1}AU_1=\begin{pmatrix}a_{11} & *\ *\ *\ *\\-\sigma & *\ *\ *\ *\\0 & *\ *\ *\ *\\0 & *\ *\ *\ *\\0 & *\ *\ *\ *\end{pmatrix}.$$

因为左上角为1，故矩阵U_1使元素a_{11}完全不变，而更重要的是，它不触动(17)式中出现的各零元素。所以，第一步即告完成，且$U_1^{-1}AU_1$含有所要求的第一列。

第二步类似第一步：x由第二列之最后$n-2$个元素组成，z为相应长度之单位向量，H_2为$n-2$阶矩阵。当我们将其置于U_2中时，我们得到

$$U_2=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\ 0\ 0\\0 & 1 & 0\ 0\ 0\\0 & 0 & \\0 & 0 & H_2\\0 & 0 & \end{pmatrix}=U_2^{-1},$$

$$U_2^{-1}(U_1^{-1}AU_1)U_2=\begin{bmatrix} * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * & * \end{bmatrix}.$$

最后，U_3将处理第三列，对于五阶矩阵来说，这样就可得到其Hessenberg形式。在一般情况下，U为所有矩阵的乘积$U_1U_2\cdots U_{n-2}$，而计算U所需之运算次数为n^3数量级。

例

$$A=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix},\quad x=\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix},\quad v=\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix},$$

$$H=\begin{bmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}.$$

将H代入U中，得三对角矩阵

$$U=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix},\quad U^{-1}AU=\begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

$U^{-1}AU$为一其特征值可以很方便地求得的矩阵——立即可用QR算法——但这里我们暂时先压下主题来提示一下Householder变换的另两个应用。

I　因子分解$A=QR$。这是第三章中Cramer-Schmidt过程之简写形式；而现在此过程实现起来会更加简单，更加稳妥。请记住，R为右上三角矩阵，我们再也没有在主对角线下破例接受一个非零的对角线的客观需要，因为右面不会有象在$U^{-1}AU$变换中那种对已经产生的零元素起破坏作用的U或H因子。因此，建立Q之第一步应与矩阵A的整个第一列打交道：

$$x=\begin{pmatrix}a_{11}\\a_{21}\\\vdots\\a_{n1}\end{pmatrix},\quad z=\begin{pmatrix}1\\0\\\vdots\\0\end{pmatrix},\quad v=x+\|x\|z,$$

$$H_1=I-\frac{2vv^T}{\|v\|^2}.$$

此时，矩阵H_1A的第一列恰好是我们所希望的：它等于$-\|x\|z$，主对角线下的元素为零，并且这是R的第一列。第二步实现矩阵H_1A第二列的变换，包括从对角元开始向下的各元素，结果，产生一个矩阵H_2H_1A，此矩阵第二列中上述对角元下的所有元素均为零（整个算法非常近似于高斯消元法，实际上这是一个稍慢一点的方案）。$n-1$个步骤的结果又是一个上三角阵R。但是，实现各步骤的矩阵，并非下三角阵L，而是乘积$Q=H_1H_2\cdots H_{n-1}$，它可以保留成这样的因子形式，并不需要明显地计算出来。Cramer-Schmidt过程就此结束。

Ⅱ 奇异值分解$Q_1^TAQ_2=\Sigma$。（在154页），此分解按最小二乘法立即给出了对任一问题之最优解$\overline{x}$。我们提醒一下，Σ为与A同形状之对角矩阵，且其元素（奇异值μ）为矩阵A^TA之特征值。因为Householder变换仅能为特征值问题准备出一个矩阵，并不能求此问题解，故我们不能期望这些变换产生最终的矩阵Σ。然而它们都产生一个双对角矩阵，此双对角阵中，除在主对角线及其上面一个对角线上外，其余各处均为零。当然，这个预备过程从数值上讲是稳定的，因为各H矩阵是正交的。

此过程的第一步和上述QR分解的第一步完全一样：A的第一列被选作x，且H_1x第一列对角元之下各元素均为零。下一步便是将H_1A在右侧乘以如下所示沿第一行产生零元素之矩阵$H^{(1)}$：

$$A\to H_1A=\begin{bmatrix}*&*&*&*\\0&*&*&*\\0&*&*&*\end{bmatrix}\to H_1AH^{(1)}=\begin{bmatrix}*&*&0&0\\0&*&*&*\\0&*&*&*\end{bmatrix}. \tag{18}$$

此后，最后两次Householder变换给出

$$H_2H_1AH^1=\begin{bmatrix} * & * & 0 & 0 \\ 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * \end{bmatrix} \quad 和$$

$$H_2H_1AH^1H^2=\begin{bmatrix} * & * & 0 & 0 \\ 0 & * & * & 0 \\ 0 & 0 & * & * \end{bmatrix}。$$

这就是我们所要得到的双对角形式。同时也再次分步示范了通过Householder变换可以产生零元素之快速方法。

练习7.3.3 证明对于相同长度的任何两个不同向量$\|x\|=\|y\|$，选择$v=x-y$会导致使$Hx=y$和$Hy=x$的Householder变换。

练习7.3.4 对于

$$x=\begin{bmatrix} 3 \\ 4 \end{bmatrix} \quad 和 \quad z=\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix},$$

计算$\sigma=\|x\|$，$v=x+\sigma z$及相应的Householder矩阵H。验证$Hx=-\sigma z$。

练习7.3.5 利用7.3.4求出从矩阵

$$A=\begin{bmatrix} 1 & 3 & 4 \\ 3 & 1 & 0 \\ 4 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

产生出来的三对角阵$U^{-1}AU$。

QR算法

此算法简单得几乎神奇。它以矩阵A_0为开始，用Cramer Schmidt法将其因子分解为Q_0R_0，然后交换两个因子的位置，得$A_1=R_0Q_0$，此新矩阵与原矩阵相似，$Q_0^{-1}A_0Q_0=Q_0^{-1}(Q_0R_0)Q_0=A_1$。此过程继续进行，同时特征值不发生变化。

$$A_k=Q_kR_k \quad 且 \quad A_{k+1}=R_kQ_k。 \tag{19}$$

此式描写的是无移位QR算法，并且在相当普遍的情况下，它是收敛的：A_k趋近于一个三角矩阵，因此，其对角元趋近其特征值，而这些特征值同时也是原矩阵A_0之特征值*。

现在的情况是，此算法好，但却不很好。为使其专用化，需做两方面的改进：(a)我们应允许原点移位；(b)应保证每步之QR因子分解颇为迅速。

(a)移位算法　如果数值α_k接近某特征值，则步骤(19)应立即移位

$$A-\alpha_k I=Q_k R_k,\ \text{之后}\quad A_{k+1}=R_k Q_k+\alpha_k I \tag{20}$$

这种过渡并不改变其特征值，因为A_{k+1}相似于A_k：

$$Q_k^{-1}A_kQ_k=Q_k^{-1}(Q_kR_k+\alpha_kI)Q_k=A_{k+1}.$$

实践中所发生的情况是，矩阵A_K之(n, n)元素（即右下角之元素）第一个接近某特征值。因此，把该元素选作位移量α_k即最简单、最普遍的做法。通常，其作用在于产生平方收敛性，而在对称的情况下，甚至产生立方收敛性，收敛到最小特征值。或许移位算法三、四步之后，矩阵A_k就会具有下述形式

$$A_k=\left[\begin{array}{ccc:c} * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ \hdashline 0 & 0 & \varepsilon & \lambda_1' \end{array}\right],\ \text{其中}\ \varepsilon\ll 1.$$

我们将已计算出的λ_1'视为真实λ_1的非常接近的近似值。为求下一个特征值，应对左上角的较小矩阵（图中为三阶），继续应用QR算法。其各子对角元在QR算法之前几步已稍有减小，从而再有两步即足可求得λ_2。上述内容给出了求所有特征值之系统步骤序列。实际上，QR算法现已完全讲述完毕。所剩工作就在于求出特征向量（这只不过是逆幂法的一步）及利用Householder法产生各零元素。

---

* A_0系QR算法以其开始的矩阵。如果它本身是通过Householder变换得来的，已为三对角形式，则A_0与原矩阵A之联系为$U^{-1}AU=A_0$。

(b) 预备性Householder变换，将A_0化成三对角或Hessenberg形式，其目的在于使QR算法之每一步做起来都很迅速。通常，Cramer–Schmidt过程（即QR分解），要进行$O(n^3)$次运算，但对Hessenberg矩阵来说，就变成了$O(n^2)$次，三对角矩阵则只需$O(n)$次，如无此改进，该算法将是一个令人无法忍耐的慢过程，而且，如不保证每个新的A_k矩阵再次具有三对角形式或Hessenberg形式，那么此项改进只能用于第一步，因而也是无成效的。

幸好，是不会发生这种情况的。为证明A_1具有和A_0相同的形式，我们来研究一下矩阵

$$Q_0 = A_0 R_0^{-1} = \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * \end{pmatrix} \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * \end{pmatrix}.$$

你可以很容易地检查出来，此乘法使Q_0保留A_0所具有的三个零元素，即Q_0本身为海森堡形式。此后，矩阵A_1通过交换因子位置的办法来形成，因此

$$A_1 = R_0 Q_0 = \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * \end{pmatrix} \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * \end{pmatrix}.$$

这三个零元素将又重新出现在乘积中，故无论何时，只要A_0为Hessenberg形式，则A_1亦为一Hessenberg矩阵。对称情况将会更好，因为$A_1 = Q_0^{-1} A_0 Q_0$仍然是对称的：

$$A_1^T = Q_0^T A_0^T (Q_0^{-1})^T = Q_0^{-1} A_0 Q_0 = A_1.$$

根据上述推理，这样构成的矩阵A_1也具有Hesssenberg形式。又因为它既对称又为Hessenberg形式，所以A_1为三对角阵。同样的论据也适应于后续矩阵A_2，A_3，…。这就是说，QR算法的每一步均以三对角阵开始。

最后要讲解的一点是因子分解本身，即从初始矩阵A_0产生Q_0和

R_0（以及由每个A_k产生Q_k和R_k，或者实际上由$A_k-\alpha_k I$产生Q_k和R_k）的过程。这里我们可以再次应用Householder变换，但通过平面"旋转"依次消每个对角元的办法会更加简单。第一次旋转将有如下形式

$$P_{21}A_0=\begin{pmatrix}\cos\theta & -\sin\theta & & \\ \sin\theta & \cos\theta & & \\ & & 1 & \\ & & & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_{11} & * & * & * \\ a_{21} & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & * & *\end{pmatrix}. \tag{21}$$

此乘积中之(2,1)元素为$a_{11}\sin\theta+a_{21}\cos\theta$，于是我们就选可使此项为零之角$\theta$。此后，$P_{32}$也以同样的方法来选择，以使矩阵$P_{32}P_{21}A_0$之(3,2)元素等于零。$n-1$次此类初等旋转之后，最终结果便为上三角因子$R_0$：

$$R_0=P_{n,n-1}\cdots P_{32}P_{21}A_0. \tag{22}$$

关于计算数学中最值得注意的算法之一，我们所能讲述的就是这些(在Wilkinson和Stewart的著作中有关于此方法的详细论述)。

练习7.3.6 证明从矩阵$A_0=\begin{bmatrix}2 & -1\\ -1 & 2\end{bmatrix}$开始，无移位算法只产生改进不大的$A_1=\frac{1}{5}\begin{bmatrix}14 & -3\\ -3 & 6\end{bmatrix}$。

练习7.3.7 对矩阵$A=\begin{bmatrix}\cos\theta & \sin\theta\\ \sin\theta & 0\end{bmatrix}$应用$QR$算法的一步，位移量取$\alpha=a_{22}$，在本题之具体情况下，这就意味着无移位，因为$a_{22}=0$。求证，非对角元将从$\sin\theta$变化到$-\sin^3\theta$（立方收敛之一例）。

练习7.3.8 证明三对角阵$A=\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}$在$QR$算法之每一步均保持不变，因此，这是罕见的收敛性的反例之一。此现象可通过引入任一位移量的办法来消除。

练习7.3.9 用归纳法求证，对无移位之QR算法，乘积$(Q_0Q_1\cdots Q_k)(R_k\cdots R_1R_0)$恰为矩阵$A^{k+1}$的$QR$因子。这种重合现象将$QR$算法与幂法联系起来了，并成为其收敛性的一种解释：如果$|\lambda_1|>|\lambda_2|>\cdots>|\lambda_n|$，则这些特征值将逐渐以降序出现在矩阵$A_k$之主

对角线上。

§7.4 解方程组Ax=b的迭代法

为解方程组$Ax=b$，我们并非绝对需要用迭代法，这与特征值问题不同，那里我们无选择的余地。Gauss消元法在有限的若干步骤之后，就可给出解x，只要这些步骤的总数是适当的，那么我们就可用这个方法。另一方面，当$n^3/3$数值很大时，我们可用快速方法求得x的近似解，如果开始用了消元法，遇到困难就半途而废，那是没有价值的。我们的目的在于讲述一些求解方法，它们由任意的初始猜想x_0开始，然而由前一个近似值x_k产生改进的近似值x_{k+1}，并且用这些方法的上述过程可根据我们的意愿随时终止。

这样的方法很容易构思出来，只要用矩阵A的分裂法即可奏效。如果$A=S-T$，那么方程组$Ax=b$便等价于方程组$Sx=Tx+b$。因此，我们可试用迭代法

$$Sx_{k+1}=Tx_k+b \tag{23}$$

当然，这种方法是否就好，并无保证。为使此法有效，矩阵之分裂需满足两个不同的要求：

(i)新向量x_{k+1}应容易算出。因此，S应为一简单且可逆之矩阵。它可以是对角阵或三角阵。

(ii)序列x_k应收敛到真实解x。如果我们从原方程$Sx=Tx+b$中减去迭代式(23)，其结果就会产生一个只含误差$e_k=x-x_k$之公式

$$Se_{k+1}=Te_k \tag{24}$$

这只是一个差分方程。它从初始误差e_0开始，k步之后，得新的误差$e_k=(S^{-1}T)^ke_0$。这里的收敛问题恰等价于稳定性问题：当$e_k\to 0$时，$x_k\to x$。

7F 当且仅当矩阵$S^{-1}T$之每一特征值λ均满足不等式$|\lambda|<1$时，迭代法(23)才收敛。其敛速取决于$|\lambda|$之最大值。后者被称为矩阵$S^{-1}T$之谱半径：

$$\rho(S^{-1}T)=\max_i|\lambda_i|. \tag{25}$$

切记，$e_{k+1}=S^{-1}Te_k$的典型解为

$$e_k=c_1\lambda_1^k x_1+\cdots+c_n\lambda_n^k x_n.$$

显然，$|\lambda_i|$中之最大者最终将取得支配地位，并将决定着e_k收敛到零的速度。

对迭代过程的两项要求，具有某种程度的矛盾性。在一个极端情况，选矩阵分裂$S=A$，$T=0$，我们即可获及收敛性，迭代过程的第一也是唯一的一步将为$Ax_1=b$。在这种情况下，误差矩阵$S^{-1}T$为0，其特征值和谱半径亦均为零，因此，敛速（通常定义为$-\log\rho$）为无限大。

但是，$S=A$当然可能不易求逆，这便是要进行矩阵分裂的原由。另一个极端情况，我们可以把S选作矩阵A之对角部分，此时之迭代法即变成了雅可比法：

$$a_{11}(x_1)_{k+1}=(-a_{12}x_2-a_{13}x_3-\cdots-a_{1n}x_n)_k+b_1$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \tag{26}$$

$$a_{nn}(x_n)_{k+1}=(-a_{n1}x_1-a_{n2}x_2-\cdots-a_{nn-1}x_{n-1})_k+b_n$$

如果对角元a_{ii}全部为非零元素，且A为稀疏矩阵，其右方的大多数项都不存在的话，则从x_k到x_{k+1}的一步很容易实现。重要的问题在于迭代过程是否收敛，如果收敛，敛速如何。

例 1

$$A=\begin{bmatrix}2&-1\\-1&2\end{bmatrix},\quad S=\begin{bmatrix}2&\\&2\end{bmatrix},\quad T=\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix},$$

$$S^{-1}T=\begin{bmatrix}0&\frac{1}{2}\\\frac{1}{2}&0\end{bmatrix}.$$

如果向量x之分量为v和w，则雅可比法$Sx_{k+1}=Tx_k+b$为

$$2v_{k+1}=w_k+b_1$$

$$2w_{k+1}=v_k+b_2$$

或 $$\begin{bmatrix} v \\ w \end{bmatrix}_{k+1}=\begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}\begin{bmatrix} v \\ w \end{bmatrix}_k+\begin{pmatrix} \frac{b_1}{2} \\ \frac{b_2}{2} \end{pmatrix}.$$

起决定作用的矩阵$S^{-1}T$之特征值为$\pm\frac{1}{2}$，这意味着误差每一步降低二分之一（准确值又增加了一个二进制位）。在此例题中，收敛速度很快，但此矩阵太小，不宜做典型。

如果我们试图设想一个较大的矩阵A，那么(26)式之Jacobi迭代法马上就会遇到一个很实际的困难。它要我们保留x_k之所有分量，直到近似值x_{k+1}计算完毕为止。一个更加自然的思想，要求保留的东西只有Jacobi法所要求的一半。这个思想在于，新向量x_{k+1}的每一个分量，一旦计算出来，便开始应用。这样，x_{k+1}将逐渐取代x_k，每次取代一个分量。因此，当x_{k+1}被建立起来时，x_k即可不予保留。

这就是说，第一个方程仍然与前相同：

$$a_{11}(x_1)_{k+1}=(-a_{12}x_2-a_{13}x_3-\cdots-a_{1n}x_n)_k+b_1.$$

下一个方程立即以此x_1之新值进行运算：

$$a_{22}(x_2)_{k+1}=-a_{21}(x_1)_{k+1}+(-a_{23}x_3-\cdots-a_{2n}x_n)_k+b_2.$$

最后一个方程将全部用新值：

$$a_{nn}(x_n)_{k+1}=(-a_{n1}x_1-a_{n2}x_2-\cdots-a_{nn-1}x_{n-1})_{k+1}+b_n.$$

上述方法纵使显然不为Gauss所知，并非Seidel建议，但仍被称为Gauss-Seidel法。这是历史上使人惊奇的一点，因为此法并不

坏。请注意，当x_{k+1}中之所有项都被移至左侧时，矩阵S即为A之下三角部分。在右侧，剩下裂矩阵$A=S-T$中矩阵T，这是严格上三角矩阵。

例 2

$$A=\begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix},\quad S=\begin{bmatrix} 2 & 0 \\ -1 & 2 \end{bmatrix},$$

$$T=\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix},\quad S^{-1}T=\begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{4} \end{bmatrix}.$$

Gauss-Seidel法之一步，将分量v_k和w_k置入

$$\begin{aligned} 2v_{k+1} &= w_k+b_1 \\ 2w_{k+1} &= v_{k+1}+b_2 \end{aligned} \quad 或 \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ -1 & 2 \end{bmatrix} x_{k+1}=\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} x_k+b.$$

矩阵$S^{-1}T$之特征值又是起决定作用的。当然，它们很容易求得：是 $\frac{1}{4}$和零。误差每次均除以 4，所以 Gauss-Seidel 法之一步等价于Jacobi法之两步*。因为此两种方法所需之运算次数相同，由于我们只用新值取代旧值，实际上会节省计算机之内存空间，故Gauss-Seidel法较好。

有一种方法可使Gauss-Seidel法得到更进一步的改进。在手算年代，曾经发现（可能是偶然的），如果在计算机校正值$x_{k+1}-x_k$时，我们稍稍超越一下 Gauss-Seidel 法，则收敛过程会更快。粗略地讲，普通方法单调收敛，即各近似值x_k停留在解x的同一侧。因此，人们自然要试图引入一个超松弛因子ω，以使近似值更接近于真实解。$\omega=1$时，即为Gauss-Seidel尔法；$\omega>1$时，此法称为逐次超松弛法（*SOR*），ω的最佳选择决定于所解的问题，但永远也

---

* 纵然可以举出其它一些Jacobi法收敛，而Gauss-Seidel法不收敛的反例，但这个规则对很大一类应用来说，还是有效的。对称情况最为直观，如果所有$a_{ii}>0$，则当且仅当A为正定矩阵时，Gauss-Seidel法才收敛。

不会超过 2，往往为1.9左右。

为将此方法解释得更明白，令D、L和U分别为矩阵A之对角，严格下三角和严格上三角部分。（此分裂和Gauss消元法中的$A=LDU$没有丝毫关系，实际上，现在我们有$A=L+D+U$。）Jacobi法中，(23)式之左侧为$S=D$，右侧为$T=-L-U$，而 Gauss-Seidel法则选择裂矩阵$S=D+L$和$T=-U$。现在，为加速收敛过程，我们转而考虑迭代法

$$(D+\omega L)x_{k+1}=[(1-\omega)D-\omega U]x_k+\omega b. \tag{27}$$

注意，当$\omega=1$时，我们得不到加速，而又回到了 Gauss-Seidel法。但是，不管ω如何，左侧之矩阵为下三角阵，右侧为上三角阵。因此，一旦某一分量计算出来，我们仍可用分量逐一地以x_{k+1}取代x_k这时，高斯——赛德尔法之一个典型步骤将具有下列形式

$$\begin{aligned}a_{ii}(x_i)_{k+1}=a_{ii}(x_i)_k+\omega[(-a_{i1}x_1-\cdots-a_{i,i-1}x_{i-1})_{k+1}\\+(-a_{ii}x_i-\cdots-a_{in}x_n)_k+b_i].\end{aligned}$$

如果旧猜想x_K与真实解x巧合的话，则新猜想x_{k+1}将与x_k相等，因而括号中的表达式将等于零。

例 3 对于同一矩阵$A=\begin{bmatrix}2 & -1\\ -1 & 2\end{bmatrix}$，超松弛法的每一步为

$$\begin{bmatrix}2 & 0\\ -\omega & 2\end{bmatrix}x_{k+1}=\begin{bmatrix}2(1-\omega) & \omega\\ 0 & 2(1-\omega)\end{bmatrix}x_k+\omega b.$$

如果我们将等式的两侧均除以ω，则得裂式$A=S-T$之矩阵S和T，迭代过程又回到了$Sx_{k+1}=Tx_k+b$的形式。这样起决定作用的矩阵$S^{-1}T$（其特征值决定此方法之收敛速度）为

$$L_\omega=\begin{bmatrix}2 & 0\\ -\omega & 2\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}2(1-\omega) & \omega\\ 0 & 2(1-\omega)\end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix}1-\omega & \frac{1}{2}\omega\\ \frac{1}{2}\omega(1-\omega) & 1-\omega+\frac{1}{4}\omega^2\end{bmatrix}.$$

参量ω的最优选择值应使矩阵L_ω的最大特征值（换言之，其谱半径）尽可能小。超松弛法的要点即在于发掘此最优的ω值。首先，各特征值的乘积必须等于行列式——如果我们考察一下相乘后得到L_ω的两个三角因子的话。第一个因子的行列式等于$1/4$（S变成逆矩阵之后），第二个因子的行列式等于$4(1-\omega)^2$，因此

$$\lambda_1\lambda_2=\det L_\omega=(1-\omega)^2.$$

下面是一条一般性的规则：第一个矩阵$(D+\omega L)^{-1}$的行列式为$\det D^{-1}$因为L的所有非零元素均位于主角线之下方；而第二个矩阵的行列式为$\det(1-\omega)D$，因为U的所有非零元素只位于主对角线的上方。在n阶矩阵的情况下，它们的乘积为$\det L_\omega=(1-\omega)^n$（这已说明，何以不去选择$\omega=2$：如果这样，特征值的乘积将很大，致使不等式$|\lambda_i|<1$不能对所有特征值都成立。于是迭代过程不能收敛）。我们也得到了了解矩阵L_ω特征值性质的一条线索，这就是：$\omega=1$时，这是Gauss-Seidel法之特征值，等于零和$1/4$，而随着ω的增大，这些特征值便彼此接近起来。当ω为最优值时，此二特征值相等，这时它们都应该等于$\omega-1$，以使其乘积等于矩阵L_ω之行列式值*。此最优ω值容易算出来，因为特征值之和永远等于矩阵对角元（L_ω的迹）之和。因此最优参数ω_{opt}由下式决定：

$$\lambda_1+\lambda_2=(\omega_{opt}-1)+(\omega_{opt}-1)$$
$$=2-2\omega_{opt}+\frac{1}{4}\omega_{opt}^2 \tag{28}$$

由此二次方程可解得$\omega_{opt}=4(2-\sqrt{3})\approx1.07$。因此，这二个相等的特征值约等于$\omega-1=0.07$，这与$\omega=1$时之Gauss-Seidel法所得之特征值$\lambda=1/4$相比，大有下降。在此例题中，$\omega$值的正确选择再次使收敛速度加快了一倍，因为$(1/4)^2\approx0.7$。

如此一项改进，竟可以轻而易举地几乎神奇般地获得成功。这样一件事情的发现，曾经是20余年来数值分析中大量活动的起点。

---

* 如果ω进一步增大，那么特征值就变成一个复共轭对—两特征值都有$|\lambda|=\omega-1$，故其乘积仍然为$(\omega-1)^2$，且它们之模将随着ω的增大而增大。

当初，第一个问题在于开发并扩展超松弛理论。1950年Young在其论文中提出了求最优ω的一个简单公式，于是这第一个问题获得了解决。该论文中的关键一步在于找出矩阵L_ω的特征值λ和原Jacobi矩阵$D^{-1}(-L-U)$特征值μ间的联系；这种联系可写为

$$(\lambda+\omega-1)^2=\lambda\omega^2\mu^2. \tag{29}$$

此公式适用于大多数有限差矩阵，如果我们取$\omega=1$（Gauss-Seidel法），那么，此式给出$\lambda^2=\lambda\mu^2$。因此，$\lambda=0$，$\lambda=\mu^2$。这一点通过上述例1和例2已经得到了证实，那里$\mu=\pm 1/4$和$\lambda=0$，$\lambda=1/4$。事实上，这种情形完全典型地代表了雅可比法和Gauss-Seidel法之间的关系：所有Young类矩阵都具有正负对的特征值μ，(29)式则表明，相应的λ即等于零和μ^2。通过对x的最新近似，我们使收敛速度加快了一倍。

重要的问题在于对此法进行更进一步的改进。我们想选择适当的ω以使最大之特征值λ极小化。很幸运，此问题已获得解决。Young方程(29)不是别的，正是二阶赋窄阵子L_ω之特征方程，而ω之最优值乃是使两根λ之模均等于$\omega-1$者。正如(28)式中那样，那里$\mu^2=1/4$，即可导致

$$(\omega-1)+(\omega-1)=2-2\omega+\mu^2\omega^2$$

或
$$\omega=\frac{2\left(1-\sqrt{1-\mu^2}\right)}{\mu^2}.$$

唯一的差别在于，对一个大矩阵来说，这种格局将就不同的$\pm\mu_i$对重复进行，我们只要正确地选择ω。这些$\pm\mu_i$对其中最大者即给出最大的Jacobi特征值μ_{max}，同时也给出ω以及$\lambda=\omega-1$之最大值。既然我们的目的在于使λ_{max}尽可能小，所以决定选择最优的ω_{opt}正是这个极值对：

$$\omega_{opt}=\frac{2\left(1-\sqrt{1-\mu_{max}^2}\right)}{\mu_{max}^2} \quad \text{和}$$

$$\lambda_{max}=\omega_{opt}-1. \tag{30}$$

这就是求最优超松弛因子的Young公式。

对于有限差矩阵A来说，其沿三主对角线的元素为-1，2，-1，我们可以很容易地计算出ω所带来的改进情况。在例题中，这是二阶矩阵，现在假设这是n阶矩阵，对应于网眼宽度$h=1/(n+1)$。最大的雅可比特征值，根据练习7.3.4为$\mu_{max}=\cos\pi h$。因此，最大之Gauss-Seidel特征值为$\mu^2_{max}=\cos^2\pi h$，而最大之逐次超松弛特征值通过将μ_{max}代入(30)式而得

$$\lambda_{max}=\frac{2(1-\sin\pi h)}{\cos^2\pi h}-1=\frac{(1-\sin\pi h)^2}{\cos^2\pi h}$$

$$=\frac{1-\sin\pi h}{1+\sin\pi h}.$$

这些数值只能通过具体例子来评价。假设A为21阶矩阵，这个阶数不算多。这时$h=1/22$，$\cos\pi h=0.99$，故Jacobi法收敛得慢：$\cos^2\pi h=0.98$，这意味着，甚至Gauss-Seidel法也要进行很多次迭代。但因为$\sin\pi h=\sqrt{0.02}=0.14$，所以最佳方案超松弛法之收敛因子等于

$$\lambda_{max}=\frac{0.86}{1.14}=0.75,\ 其\omega_{opt}=1+\lambda_{max}=1.75.$$

每一步误差降低25%，于是超松弛法之一步等价于Jacobi法之30步：即$(0.99)^{30}=0.75$。

这是如此简单的一种思想得来的一个惊人的结果。其实际应用并不在于一维问题（常微分方程），因为有三对角矩阵的方程组$Ax=b$已经是很容易解的。正是在多维情况下，对于偏微分方程，超松弛法才显得特别重要。如果我们以单位正方形$0\leqslant x, y\leqslant 1$取代单位区间$0\leqslant x\leqslant 1$，并把方程$-u_{xx}=f$改成$-u_{xx}-u_{yy}=f$，那么，自然有限差分模拟将为“五点格式”。$x$方向的系数$-1$，$2$，$-1$和$y$方向的系数$-1$，$2$，$-1$组合，结果得到其元素为$+4$之主对角线以及元素为$-1$的四个其它对角线。但矩阵$A$的带宽并不等于5，没有一种编号办法能安排正方形中之N^2个网眼结点，使每个

结点紧接其所有四个相邻结点。如果排序逐行进行，那么，每一点必须等待一整行排完，其上邻点出现。结果此"五点矩阵"之带宽为N：

$$A=\begin{pmatrix} \ddots & & \ddots \;N\rightarrow \ddots \\ \ddots & \ddots & \ddots \\ \ddots & & \ddots \end{pmatrix}$$

与任何其它线性方程$Ax=b$相比，这种矩阵或许更多地引起了人们的注意力，被人们以更多的方法进行了攻关。笔者认为，现在的趋势又回到了直接法，这些方法以Golub和Hockney的一种思想为基础：某些特殊矩阵，如经恰当处置，则可离析。（它可与所谓"快速Fourier 变换"相比拟。）从前出现过交替方向的迭代法。这些方法将x方向的三对角矩阵和y方向的三对角矩阵分离开来。更早些时候，因为Jacobi特征值$\mu_{max}=\cos\pi h$和一维情况下的特征值一样，并且超松弛因子ω_{opt}也等于此值，所以出现了超松弛法。在每一种情况下，困难都在于如何从模型问题过渡到真实问题。每种方法对于比$-u_{xx}-u_{yy}=f$更一般化的方程，比正方形更一般化的几何领域，都有其自己应变之可能性。

我们不能不提到共轭梯度法来结束这段论述。共轭梯度法好像已经无人应用了，但是现在突然又非常活跃起来了。它与其说属于迭代法勿宁说属于直接法范畴。但是，与消元法不一样，它可以停在某一步上。无需说，有可能会有某种全新的思想出现并会占上风。然而公平地说，从0.99变到0.75，这正是在解方程组$Ax=b$中的一场革命。

练习7.4.1 对于特征值为$2-\sqrt{2}$，2，$2+\sqrt{2}$的矩阵

$$A=\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix},$$

求其雅可比矩阵 $D^{-1}(-L-U)$ 以及该 Jacobi 矩阵的特征值，Gauss-Seidel矩阵$(D+L)^{-1}(-U)$及其特征值，逐次超松弛法之ω_{opt}和λ_{max}值。无需计算出矩阵L_ω。

练习7.4.2 对于n阶矩阵

$$A=\begin{pmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & \cdot & \cdot & \\ & \cdot & \cdot & -1 \\ & & -1 & 2 \end{pmatrix},$$

写出雅可比矩阵$J=D^{-1}(-L-U)$。证明向量$x_1=(\sin\pi h, \sin 2\pi h, \cdots, \sin n\pi h)$为$J$之一特征向量，对应于特征值$\lambda_1=\cos\pi h=\cos\pi/(n+1)$。

练习7.4.3 对同一矩阵A，求证向量$x_k=(\sin k\pi h, \sin 2k\pi h, \cdots, \sin nk\pi h)$是一特征向量，且其它特征值为$\lambda_k=\cos k\pi h$，故各$\lambda$确实以正、负对的形式出现($\lambda_n=-\lambda_1$，$\lambda_{n-1}=-\lambda_2, \cdots$)，同时，$\lambda_{max}=\cos\pi h$。

下面的几则练习要用到Gerschgorin的“圆周定理”：矩阵A之每一个特征值均至少位于$C_1,\cdots,C_n$之某一圆内，这里C_i以对角元a_{ii}为圆心，而其半径$r_i=\sum_{j\neq i}|a_{ij}|$，即为该行其它各元素绝对值之和。

证明 方程$Ax=\lambda x$之按分量写法为

$$(\lambda-a_{ii})x_i=\sum_{j\neq i}a_{ij}x_j$$

或

$$|\lambda-a_{ii}|\leqslant\sum_{j\neq i}|a_{ij}|\frac{|x_j|}{|x_i|}$$

如果x之最大分量为x_i的话，那么，对所有$j\neq i$的情况来说，$|x_j|/|x_i|\leqslant 1$，因此，$|\lambda-a_{ii}|\leqslant r_i$，即$\lambda$位于第$i$个圆内。

练习7.4.4 矩阵

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 1 & 1 \\ 0 & 4 & 1 \\ 2 & 2 & 5 \end{bmatrix}$$

被称为对角占优矩阵，因为每一个 $|a_{ii}| > r_i$。求证，零不会位于任何一个Gerschgorin圆内，并得出结论，A为非奇异矩阵。

练习7.4.5 对此对角占优矩阵A，写出其Jacobi矩阵J，求出J之三个Gerschgorin圆。求证所有半径都满足不等式$r_i<1$，并说明为什么Jacobi迭代法会收敛。

练习7.4.6 方程组$Ax=b$之真实解稍稍不同于$LUx_0=b$之解，因为$A-LU$由于四舍五入误差的关系为非零矩阵。提高近似解精度的可能性之一是处处都采用双精度计算。但是，比较好并且快的方法是迭代改善精度法：只用双精度计算向量$r=b-Ax_0$，然后解方程组$LUy=r$，把所得之校正值y加到x_0中去。问题：将向量$x_1=x_0+y$乘以矩阵LU，将结果写成裂式形式$Sx_1=Tx_0+b$，并说明，为什么T非常小。这一步几乎可以使我们得到真实解x。

第八章　线性规划和对策论

§8.1　线性不等式

线性代数与分析不同，它仅与解方程有关，而与不等式没有关系。这两者之间的界限似乎是明显的。但是，笔者最后意识到，线性规划却是一个反例，它是研究不等式的，然而毫无疑问是线性代数的一部分。这一点对于对策论同样也是对的。对这些学科的探讨有三个途径：或直观上用几何法；或计算上用单纯形法；或代数上用对偶理论法。对于线性规划，这些方法在本节、§8.2和§8.3中进行了研究。此后，在§8.4中将研究具有整数解的问题，§8.5讨论扑克游戏及其它矩阵对策，最后说明一下极小极大理论及其与线性规划的对偶理论的关系。

本章的关键在于了解线性不等式的几何意义。线性不等式把 n 维空间分成两个**半空间**，其中一个满足不等式，而另一个则不满足。不等式$x+2y\geqslant 4$就是一个具体的例子。这两个半空间的界是直线$x+2y=4$，在此直线上不等式转化为等式。此直线上方为 $x+2y\geqslant 4$半空间（图8.1），而在其下方为与其相反的半空间，在这半空间不满足此不等式。在三维情况下，图形几乎是一样的；只是界转化成了平面。例如，$x+2y+z=4$，在其上方为半空间 $x+2y+z\geqslant 4$。在 n 维情况下，我们同样称$n-1$维的界为“平面”。

对这类不等式，还补充一个线性规划中很根本的约束：量 x 和 y 应当是非负的，当然，这个约束本身即为一对线性不等式：$x\geqslant 0$ 和 $y\geqslant 0$。所以，我们还有两个半空间，它们的界就是坐标轴：满足不等式$x\geqslant 0$的所有容许点在直线$x=0$的右侧，而$y\geqslant 0$ 给定了直线$y=0$上方的半空间。

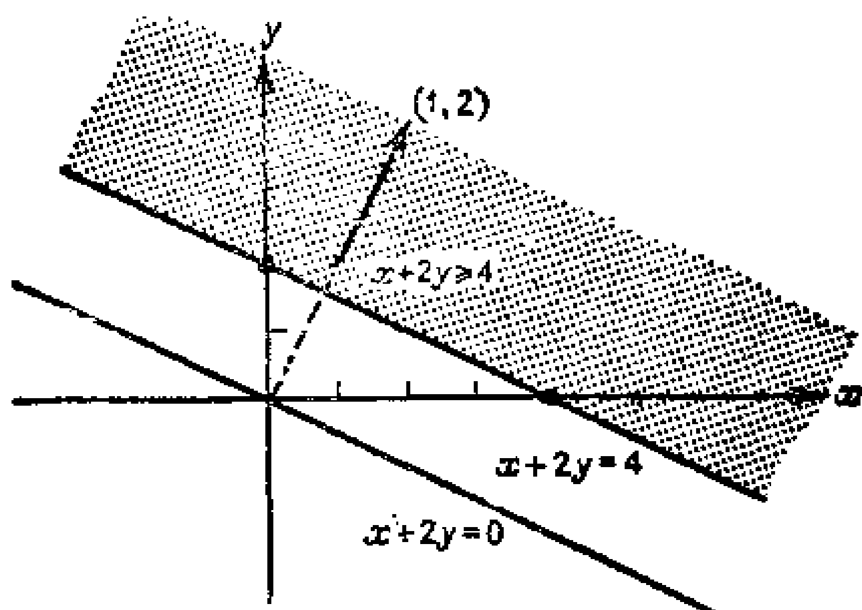


图 8.1 方程和不等式

重要的一步在于同时考虑三个不等式：$x+2y\geqslant 4$，$x\geqslant 0$，$y\geqslant 0$。从几何上讲，它们组合的结果给出了图8.2中的阴影区域，此区域是$x+2y\geqslant 4$，$x\geqslant 0$和$y\geqslant 0$等三个半空间的**交集**。它已经不是半空间，而是一个在线性规划中称为**容许集**的典型例子，换句话说，容许集是由线性不等式组的解组成的。

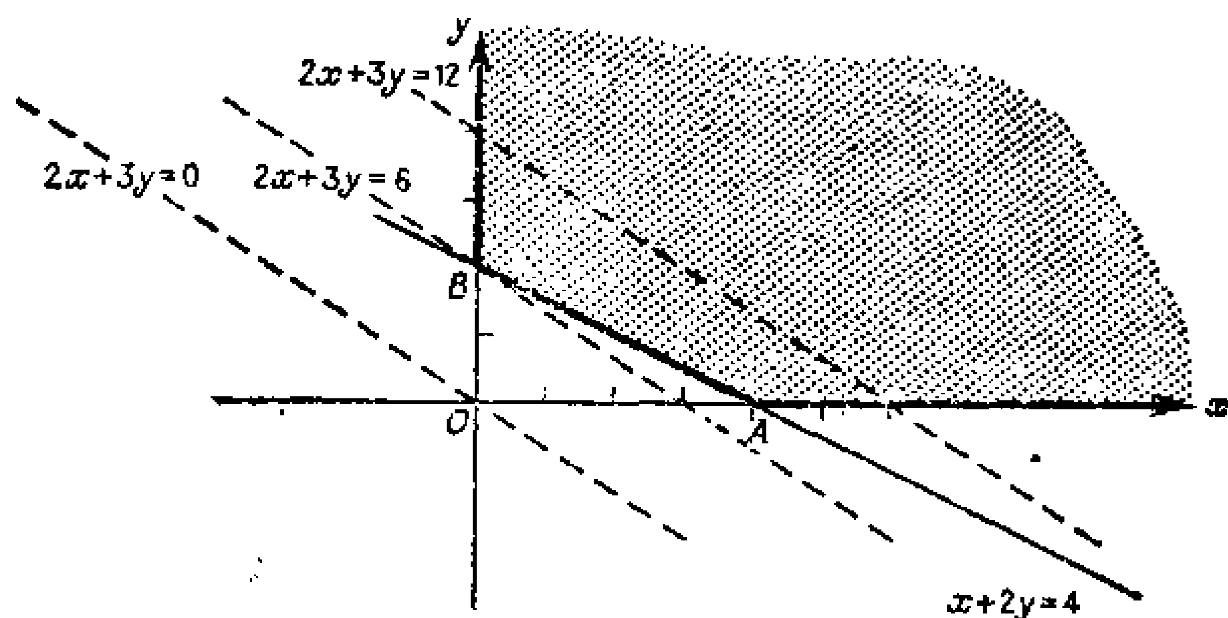


图 8.2 容许集和价值函数$2x+3y$

不难发现，由n个独立变量m个方程所组成的线性方程组 $Ax=b$，实际上描绘m个不同的平面的交集，每个方程是一个平面。（当$m=n$且各平面相交时，它们相交于对应解为$x=A^{-1}b$的一点）。同理，m个不等式组$Ax\geqslant b$描绘m个半空间的交。此外，如果要求向量x的每一个分量均为非负的（以向量不等式的形式表示为$x\geqslant 0$），那么，结果又生成n个半空间。所加的约束越多，容许集就越小。

如果上述例子改为半空间$x+2y\leqslant 4$的话，且保留不等式$x\geqslant 0$，$y\geqslant 0$，则此集是有封闭边界的。结果我们得到三角形OAB。联立不等式$x+2y\geqslant 4$和$x+2y\leqslant 4$，容许集即退化成一条直线：两个相反的约束结合起来，得到等式$x+2y=4$。如果我们附加一个与前矛盾的约束，例如$x+2y\leqslant -2$，那么，容许集将变成空集*。

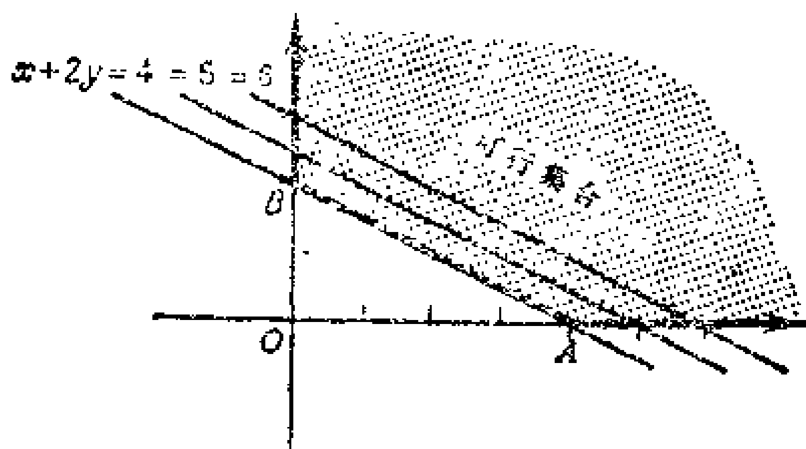
线性不等式组(或容许集)代数是我们本课程之一部分。然而，在线性规划中还有另外一个非常重要的组成部分，即：我们所感兴趣的**不是所有容许点，而是使某个"价值函数"极大化或极小化的特定点**。对于例子$x+2y\geqslant 4$，$x\geqslant 0$，$y\geqslant 0$，我们再增添一个价值函数（或目标函数）$2x+3y$，那么，真正线性规划问题就在于求出容许集中使价值函数极小化之一点x，y。

对上述线性规划问题，以图8.2给以几何解释。一组价值函数$2x+3y$给出了一组平行直线，我们要求极小价值，换句话说，就是与容许集最先相交的直线。交点显然在B点，$x^*=0$和$y^*=2$，极小值为$2x^*+3y^*=6$。向量（0，2）叫做**容许向量**，因为它属于容许集；它又是最优向量，因为它使价值函数（在容许集上）取得极小值，并且极小价值6为此规划的**值**。我们将以星号表示最优向量。

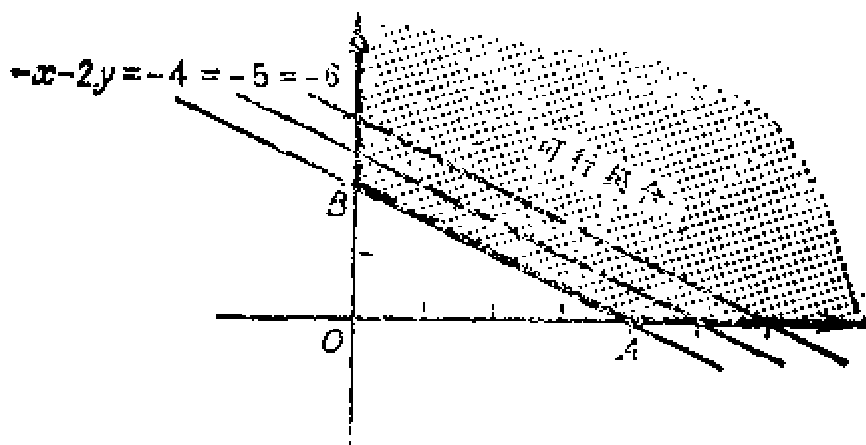
容易看到，最优向量位于容许集的角上。这一点是由几何来保证的，因为价值函数的直线（或者，独立变量更多时为平面）不断向上移动，直到与容许集相交为止，第一个交点必定发生在此容许集的边界上。然而，不同的价值函数与容许集的交可能不只是一个

* 半空间$x+2y\leqslant -2$与第一象限$x\geqslant 0$，$y\geqslant 0$不相交。

点：如果价值函数恰好为$x+2y$，则B和A点之间的整个边界将同时与价值函数相交，在此边界上将有无穷多个最优向量(图8.3a)。最优值仍然是唯一的（x^*+2y^*对所有的最优向量均等于4）。因此，极小问题仍然有确定的答案。另一方面，极大问题将无解：因为，在上述容许集上，这个价值可增至任意的高度，故价值的极大值为无穷大。或者，分析这种可能性的另外一种方法，来研究极小问题，应取相反的价值函数$-x-2y$。那么，如图8.3b所示，极小值为$-\infty$，这里还是无解。每一个线性规划问题都将属于下列三种可能范畴之一：其容许集为空集，或其价值函数在容许集上无界，或者对线性规划有唯一的有限值(具有一个或无穷多个最优向量)。



(a) 价值函数$x+2y$极小值4



(b) 价值函数$-x-2y$极小值$-\infty$

图 8.3 特殊情况，无穷多个最优向量和无最优向量

前面两种情况，对于实际的经济或工程问题是很少见的。

存在一种简单的方法，把约束不等式变为等式，即引进松弛变量$w=x+2y-4$，这就是我们的方程！原来的约束$x+2y\geqslant 4$变成了$w\geqslant 0$，这可与其余的两个约束$x\geqslant 0$，$y\geqslant 0$极好地协调起来。单纯形法即从这一步开始：对于每一个不等式引进松弛变量，结果得出只有方程和简单的非负约束。

原问题的解释与其对偶

不常见的情形就谈到这里。现在，我们想回到价值函数为$2x+3y$的原来的例子上来，并给一文字表达。这是线性规划中"饮食问题"的一个实例。这里有两个蛋白质来源：煎牛排和花生油。每一磅花生油提供一个单位的蛋白质，每一磅牛排提供两个单位的蛋白质。而每餐食物至少应含有四个单位的蛋白质。所以含有x磅花生油和y磅牛排的一餐食物受下列不等式约束：$x+2y\geqslant 4$，$x\geqslant 0$，$y\geqslant 0$（不可能有负量的牛排或花生油）。这就是容许集，且问题在于使花费最少。如果一磅花生油价值2美元，而一磅牛排价值3美元，那么一餐饮食的花费为$2x+3y$，恰巧，最优的一餐是只吃牛排：$x^*=0$和$y^*=2$。

每一个线性规划，包括上述饮食问题，都有一个与之对偶的线性规划。如果原问题为极小化问题，那么，与之对偶的线性规划即为极大化问题，而且其中一个问题的解直接导致另外一个问题的解。实际上，所给的原问题的极小就等于与其对偶问题的极大。这是线性规划理论中的中心结果。在§8.3中将对其进行讲述。这里我们仍谈饮食问题。并试图对其对偶问题做出解释。

这里的对偶问题乃是出售合成蛋白质的售货员所面对的问题，而不再是顾客在牛排花生油之间进行选择，以期以最低的花费来得到定量的蛋白质。售货员力图与牛排和花生油进行竞争。因此，我们立刻遇到典型的线性规划问题中的两个组成部分：售货员想使价格p最高，但是这个价格要受线性约束。首先，合成蛋白质的价格

不应当高于花生油中的蛋白质（两美元一个单位）或牛排中的蛋白质（3美元两个单位）的价格。同时，价格不应当是负的，否则，售货员就不会出售。因为饮食要求为四个单位的蛋白质，故卖主的收入将为$4p$。对偶问题为：在约束 $p\leqslant 2, 2p\leqslant 3$ 和 $p\geqslant 0$ 的条件下极大化$4p$。这是一个对偶问题要比原问题容易解的例子。因为它只有一个独立变量。很明显，$2p\leqslant 3$ 是实际起作用的一个约束，合成蛋白质的最大价格为1.5美元。所以，最大的收入是$4p=6$美元。这就是原问题的最小价值。且顾客到头来要为天然蛋白质和合成蛋白质支付同样的费用。这正是对偶理论的意义之所在。

练习8.1.1 画出约束为 $x+2y\geqslant 6$，$2x+y\geqslant 6$，$x\geqslant 0$，$y\geqslant 0$ 的容许集。位于这个集合的三个"角"上的是怎样的点？

练习8.1.2 （推荐练习）对于上一个练习的容许集，价值函数 $x+y$ 的最小值是什么？画出初次接触容许集的直线 $x+y=\text{const}$。价值函数为$3x+y$和 $x-y$ 时又如何？

练习8.1.3 证明，被不等式 $x\geqslant 0$，$y\geqslant 0$，$2x+5y\leqslant 3$，$-3x+8y\leqslant -5$所限定的容许集是空集。

练习8.1.4 证明下述问题是可行的，但是无界，因此，下述问题：在约束为 $x\geqslant 0$，$y\geqslant 0$，$-3x+2y\leqslant -1$，$x-y\leqslant 2$ 的条件下极大化 $x+y$，没有最优解。

练习8.1.5 在 $x\geqslant 0$，$y\geqslant 0$ 的基础上，增加一个约束不等式，以使容许集只包含一个点。

练习8.1.6 $x\geqslant 0$，$y\geqslant 0$，$z\geqslant 0$，$x+y+z=1$ 的容许集具有怎样的形式，表达式 $x+2y+3z$的最大值等于什么？

典型应用实例

在下一节，我们着重解线性规划问题（公式暂略）。因此，现在我们该描述几个可能引出下列数学问题的实际例子：在线性约束下，极小化或极大化一个线性价值函数。

1. 证券的组合。假设有三类有价债券：联邦债券，评估为A

级，年息5%；市政债券，评估为B级，年息6%；铀公司的债券，评估为C级，年息9%。我们购买这些债券的数量分别为x，y和z，但三者总和不得超过10万美元。问题是，在下述条件下，使得盈利最大：

i）对铀矿的投资不得超过20000美元；

ii）所购债券组合的平均估值不应低于B级。

问题：极大化　$5x+6y+9z$

条件：$x+y+z\leqslant 100000$

$$z\leqslant 20000$$

$$z\leqslant x$$

$$x,y,z\geqslant 0$$

2．生产计划　假设通用汽车公司，每一辆雪弗莱牌汽车可获利100美元，每一辆毕克牌汽车可获利200美元，每一辆卡迪拉克牌汽车可获利400美元。每一加仑汽油它们分别可行驶20、17、14英里。而国会规定，每辆汽车一加仑汽油平均应行驶18英里。工厂装配雪弗莱一辆需用一分钟，一辆毕克需用二分钟，一辆卡迪拉克需用三分钟。在8小时工作日内最大的盈利是多少？

问题：极大化　$100x+200y+400z$

条件：$20x+17y+14z\geqslant 18(x+y+z)$

$$x+2y+3z\leqslant 480$$

$$x,y,z\geqslant 0。$$

练习8.1.7　解证券的组合问题

练习8.1.8　第二个例子容许集中，非负性条件$x,y,z\geqslant 0$分出三维空间的八分之一（正卦限）。它如何被两个相应的约束平面切割？容许集具有怎样的形式？它的各角怎样显示出：在这两个约束下最优解处将只有两个牌号的汽车？

练习8.1.9　运输问题。假设，得克萨斯州、加里福尼亚州和阿拉斯加州各生产100万桶石油，芝加哥需要80万桶，且离上述各产地的距离分别为1000，2000和3000英里。其余220万桶运往新英

格兰，距离分别为1500，3000和3700英里。如果每桶的运费，一英里一个单位价格，那么需要解具有五个约束等式的怎样的线性规划，使得运往芝加哥的运输量 x，y，z 和运往新英格兰的运输量 u，v，w 是最优的？

§8.2 单纯形法

这一节将讲述具有 n 个独立变量和 m 个约束的线性规划。前面一节我们已经介绍了 $n=2$ 和 $m=1$ 的情况。在那里曾有两个非负的变量 $x\geqslant 0$，$y\geqslant 0$ 和一个约束：$x+2y\geqslant 4$。一般的情况，并不难解释，但是求解不太容易。

描述线性规划问题，最好的方法是把它写成矩阵的形式。n 个独立变量构成一个非负的列向量：$x=(x_1, x_2, \cdots, x_n)^T$。这个向量要是容许的，它除了满足 $x\geqslant 0$ 以外，还应满足 m 个约束，我们把这些约束记作 $Ax\geqslant b$。矩阵 A 为 $m\times n$ 阶，并且它的每一行都给出一个不等式（正如本书其余部分中，方程组 $Ax=b$ 的每一行都给出了一个等式一样）。矩阵 A 和向量 b 已经给定，对于约束 $x+2y\geqslant 4$，我们有 $A=(1, 2)$ 和 $b=(4)$。价值函数也已经给定，并且亦为线性函数；它等于 $c_1x_1+c_2x_2+\cdots+c_nx_n$，或 c^Tx。问题在于求出使价值函数极小化的容许向量，该向量即为最优向量。

标准的极小问题：在条件 $x\geqslant 0$，$Ax\geqslant b$ 下，极小化 c^Tx。

几何解释是明显的。第一个条件 $x\geqslant 0$，限定向量在 n 维空间的"正象限"内，这是所有半空间 $x_j\geqslant 0$ 的公共区域。在三维的情况下，是八分之一空间，一般地，向量有 2^n 分之一的几率为非负向量。其它 m 个约束产生 m 个附加半空间，满足所有 $m+n$ 个条件者为容许向量，它们位于 $x\geqslant 0$ 象限且同时满足 $Ax\geqslant b$。换句话说，容许集为 $m+n$ 个半空间的交，它可以是有界的（平面边界）、无界的或空集。

价值函数 c^Tx 为一整族平行平面。该族中成员之一即为通过坐

标原点者乃是$c^Tx=0$平面。如果x满足此方程，那么它就是"零价值"量。其余的$c^Tx=\text{const}$平面将给出所有其它可能的价值。随着价值的变化，这些平面将扫过整个n维空间。最优向量x^*发生在这些平面首次与容许集相接触的点上，这个向量x^*是容许的，并且对应的价值c^Tx^*是容许集内的最小值，这样说来，x^*即线性规划中标准的极小问题的解。

在这一节，我们的目的便是计算最优解x^*。在原则上我们通过求容许集的所有角并计算这些角的价值函数值的方法是能够作到这一点的。这时，最小价值的角将是最优点。然而，在实践中这样的方法是不可行的，因为这样的角数以百万计，我们不可能把它们全部计算出来。因此，我们便转向**单纯形方法**。毫无疑义，这种方法可以认为是现代计算数学中最值得赞美的思想。它是由Dantzig（坦兹克）发展起来的求解线性规划问题的系统方法。或由于幸运，或由于他的天才，使他获得了令人叫绝的成就。这个方法的步骤在后面将给以综述，但是，我们首先力争在这里将它们尽可能地阐述清楚。

笔者认为，几何解释可以把这个方法讲得更加明白。第一步，我们只求容许集的一个角，这是"第一个阶段"。假设这一阶段已经完成。此后，第二个阶段为此法之核心，**沿着容许集的棱边由一个角过渡到另一个角**。在典型角上有n个棱边可供选择，其中某些棱边将远离最优的但却未知的x^*，另一些则逐渐逼近x^*。坦兹克选择保证价值下降的棱边，沿着这条棱边得到一个较小价值的新角。并且已不可能再返回任何更高的价值。最终达到一个特别的角，从这个角出发离去的所有棱边都不会导致价值的下降：即价值已经极小化了。这个角给出了最优向量x^*，于是过程就此结束。

现实的问题在于把这个思想在线性代数中体现出来。首先需要说明n维空间中角和棱边的概念。一个角乃是n个不同平面之交点，每一个平面都由一个方程给定，恰如三个平面（或者说前壁，侧壁和地板）产生一个三维的角。要知道，在线性规划中的容许集

是由m个不等式$Ax \geqslant b$和n个不等式$x \geqslant 0$所确定的。容许集的每一个角都是通过将此$m+n$个不等式中的n个转变为等式，并求出此n个平面的交点的办法而得来的。特别地，一种可能性是选择$x_1=0$，…，$x_n=0$等n个方程。最后得到的结果为坐标原点。象所有其它可能的选择一样，此交点即为容许集的一个真角，如果它也满足其余的m个约束条件的话。否则，它甚至不在容许集内，而是一个十足的冒牌货。练习8.1.1的例子中含有$n=2$个变量，$m=2$个约束，如图8.4所示，有六个可能的交点，其中三个实际是该容许集的角。这三个角用P、Q、R表示。它们即是向量（0，6），（2，2）和（6，0），且其中之一必定是最优向量（极小价值为$-\infty$之情况除外）。包含坐标原点在内的其它三个交点为冒牌货。

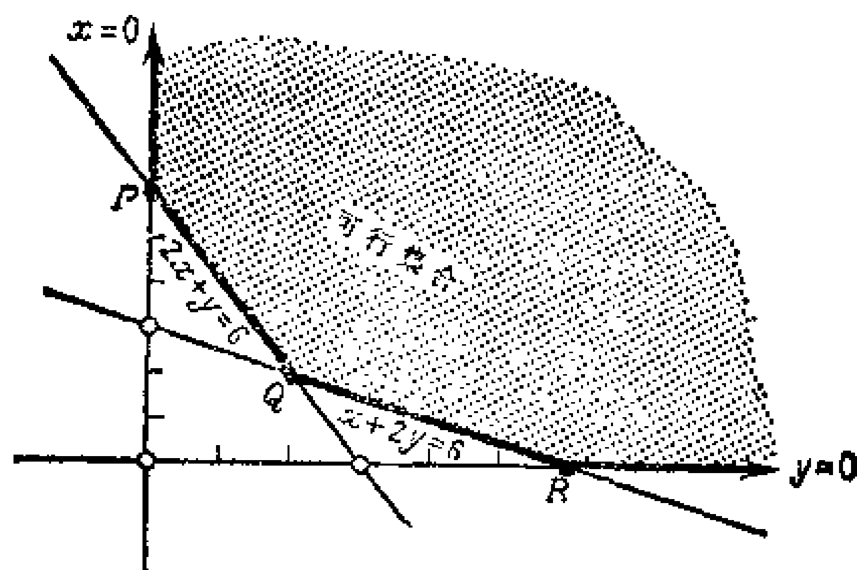


图 8.4 容许集的角和棱边

在一般的情况下，可能有$(n+m)!/n!m!$个交点，因为此总数等于由$n+m$个候选平面中选出n个的组合数*。如果容许集是空集，则当然这些交点无一是真角。第一个阶段的任务是，或者求出容许集的一个真角，或者确定容许集为空集。现在我们在假设某个

* 这个数的大小表明，为什么说在n很大时，要计算出所有的角是完全不现实的。

角已经求出的前提下，继续讲解。

现在，我们来研究一个棱边：假设由 n 个相交的平面中取消一个，仅留下 $n-1$ 个方程，于是，便有一个自由度。满足 $n-1$ 个方程的点组成一条由角出发的棱边，在几何上这是此 $n-1$ 个平面的交线。线性规划迫使我们留在容许集内，所以，我们没有沿此棱边选择运动方向的余地：只一个方向是容许的。然而，我们都可以从几条不同的棱边中选择任何一条，第二阶段即应实现这种选择。

为了描述这个阶段，我们必须把 $Ax \geqslant b$ 改写成完全类似于 n 个简单约束 $x_1 \geqslant 0$，…，$x_n \geqslant 0$ 之形式。这个职责就落在了松弛变量 $z = Ax - b$ 的肩上。这 m 个约束 $Ax \geqslant b$ 被转化为 $z_1 \geqslant 0$，…，$z_m \geqslant 0$，矩阵 A 的每一行都有一个松弛变量。这时方程 $z = Ax - b$ 或 $Ax - z = b$ 便可写成矩阵的形式

$$[A \quad -I]\begin{bmatrix} x \\ z \end{bmatrix} = b。$$

容许集由这 m 个方程和 $n+m$ 个简单的不等式 $x \geqslant 0$，$z \geqslant 0$ 来确定。换句话说，一个通常的问题就此转化成了具有**等式约束**的规范形式。

为了完成这种变换，尚须消除原来的 x 和新得到的 z 之间的差别。因为单纯形法对它们并不作任何区分，故继续沿用记号

$$[A \quad -I] \quad 和 \quad \begin{bmatrix} x \\ z \end{bmatrix}$$

就毫无意义了。所以，我们将扩展了的矩阵重新命名为 A，而将扩展了的向量重新命名为 x。此时约束等式即为 $Ax = b$，而 $n+m$ 个简单的不等式就只变为 $x \geqslant 0$ *。初始价值向量 c 需要加上 m 个零分量进行扩展，这时价值 $c^T x$ 对 x 和 c 的新的含义与对旧的含义是一致的。引入松弛变量所留下的唯一痕迹在于新的矩阵 A 的阶为 $m \times (n+m)$，新的向量 x 将有 $n+m$ 个分量。原表示法中，我们

* 当然，在经济和工程技术问题中，本来约束可能就是等式形式，在这种情况下，单纯形方法将直接用方程组 $Ax = b$——无需引入松弛变量。

保留了m和n的原始含义，以其作为进行了代换的备忘录。

例 在图8.4所示的问题中，约束条件为$x+2y\geqslant 6$，$2x+y\geqslant 6$，价值函数为$x+y$，其新方程组有如下形式

$$A=\begin{bmatrix}1 & 2 & -1 & 0\\ 2 & 1 & 0 & -1\end{bmatrix},$$

$$b=\begin{bmatrix}6\\ 6\end{bmatrix} \quad 和 \quad c^T=[1\ 1\ 0\ 0]。$$

单纯形法即可从这种把约束条件变成等式的过程开始。请注意，第一个阶段已经求得容许集的一个角，即n个平面的交点：n个原来的不等式$x\geqslant 0$和$Ax\geqslant b$（或$z\geqslant 0$）已经变换成了方程。换句话说，角乃是新向量x（或原向量$\begin{bmatrix}x\\ z\end{bmatrix}$）之$n$个分量均为零的点。在方程组$Ax=b$中，向量$x$的这$n$个分量我们认为是自由变量，其余的$m$个分量则为基变量。那么，把此$n$个自由变量置为零，我们即可由$m$个方程$Ax=b$求出此$m$个基变量。这个解$x$就称为基本解，以强调说明它完全依赖于基变量。除具有n个零分量外，如向量x的非零分量亦为非负的话，这是一个真角，即属于容许集。

8A 容许集的角是方程组$Ax=b$的基容许解：在$m+n$个分量中有n个分量等于零的解x是基解，当$x\geqslant 0$时此解是基容许解。单纯形法的第一个阶段求出一个基容许解，而第二个阶段则逐步移向最优解。

例 图8.4上的角点P就是直线$x=0$和$2x+y-6=0$的交点。所以向量x的两个分量等于零，而其余两个分量是正的。于是，它是基容许解：

$$Ax=\begin{bmatrix}1 & 2 & -1 & 0\\ 2 & 1 & 0 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\ 6\\ 6\\ 0\end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix}6\\6\end{bmatrix}=b。$$

还有一个主要决策要做：我们应沿哪一条棱离开这个角？我们已经求得一个角，其中向量 x 的 m 个分量是正的，而其余分量为零。现在我们想要沿着容许集的棱边移向邻角。此两角相邻这一事实，意味着 m 个基变量中有 $m-1$ 个**仍然是基变量**，只有一个自由变量 r 变为零。同时，自由变量中有一个变成了基变量，其值已由零变正，而其余 $m-1$ 个基变量虽然变化，但却依旧为正。问题在于要决定什么样的变量应从基变量中离开，什么样的变量应该补充进来。如果我们知道，哪 m 个变量为新角的基变量，则其值可以用解 m 个方程 $Ax=b$ 的方法计算出来。这里向量 x 之其余分量被认为是零。

现在让我们举例说明：

极小化　$7x_3-x_4-3x_5$

条件　　$x_1+x_3+6x_4+2x_5=8$

　　　　$x_2+x_3\qquad\quad+3x_5=9$

我们从 $x_1=8$ 和 $x_2=9$（它们是基变量）和 $x_3=x_4=x_5=0$ 这个角开始，约束条件是满足的，但是价值可能并非最小。事实上，正是价值函数确定什么样的自由变量需要引为基变量。令 x_3 为正变量那是笨拙的，因为其系数为 $+7$，而我们试图减少价值。选择变量 x_4 或 x_5 是比较适宜的，于是我们选定 x_5 进基，因为其系数 -3 更负一些。如果所有的系数都是正的，则原来的解就已经是最优的了。

如果变量 x_5 进基，那么，或 x_1 或 x_2 应当出基。若在第一个方程中增大 x_5 减小 x_1，同时保持 $x_1+2x_5=8$ 成立，那么在 $x_5=4$ 时，$x_1=0$。然而，这时在第二个方程中 x_2 已成为负值：$x_5=4$ 引起 $x_2=-3$。我们的规则是：使 x_5 增大直到基变量之一等于零为止，此后，该基变量便成为自由变量。在这种情况下，$x_5=3$ 时 $x_2=0$，且从第一个方程中得到 $x_1=2$。此时，价值下降到 -9。在一般情况下，我们计算方程右边部分与进基变量的系数之比，8/2和

9/3，最小比指出，那一个变量成为自由变量。

此规则只考虑正的比值，因为如果x_5的系数为-3而非$+3$，那么，增大x_5，将使x_2也同时增大（$x_5=10$，在第二个方程中$x_2=+39$）因此，我们永远也得不到零值x_2。若x_5的所有系数均为负值，这就是无界的情况：x_5可以无限增大，而价值将随之减小至$-\infty$，且这时离不开容许集。棱边是无穷长的。

在我们这种情况下，第一步终止于角$x_1=2$，$x_2=x_3=x_4=0$，$x_5=3$。然而，仅在方程具有适当的形式时，即基变量被分离开来，正如本题在原来情况下对基变量x_1和x_2所做得那样，下一步才会是简单的，为此，我们解出第二个方程中的x_5，并将结果代入到价值函数和第一个方程中去，以实现"主元的分离"：$3x_5=9-x_2-x_3$，这样，新问题便具有如下形式：

极小化 $7x_3-x_4-(9-x_2-x_3)=x_2+8x_3-x_4-9$

条件 $x_1-\frac{2}{3}x_2+\frac{1}{3}x_3+6x_4=2$

$$\frac{1}{3}x_2+\frac{1}{3}x_3+x_5=3.$$

下一步实现起来即很简单。在价值函数中，有唯一的负系数，这就意味着变量x_4应当进基。比2/6和3/0意味着变量x_1应当离基。此时，新角将由关系式$x_1=x_2=x_3=0$，$x_4=\frac{1}{3}$，$x_5=3$给定，新的价值等于$-9\frac{1}{3}$。此价值即为最优者。

在维数较多的问题中，要离开的基变量随后可能重新复基。然而，由于价值继续下降（退化情况除外），故m个基变量全部都返回的情形是不可能发生的。任何一个角都不会被访问两次，并且过程应当停止于最优角（或者在价值无界的情况下，停止于$-\infty$）。此法最精彩之处在于其快速性，人们可以很迅速地求出最优角。

关于退化性的一点说明。如果在某角处向量x中等于零的分量不止n个，而更多一些，即过该角的约束平面多于n个且有一些基变量变成了零，那么，该角即称为退化角。在单纯形法中，在方程

的右侧出现零便是退化的一个征兆。结果，确定离开变量的比值中将会有零。且基可能在不出该角的范围内发生。事实上，在选基过程中，我们可能无限次地在原地兜圈子。

这种情形可以消除，或通过对单纯形法的适当改造，或通过预料这种循环不会发生。幸好，后者与计算的实践是相一致的。

练习8.2.1 极小化$x_1+x_2-x_3$

条件 $2x_1-4x_2+x_3+x_4=4$，

$3x_1+5x_2+x_3+x_5=2$

变量x_1，x_2，x_3中哪一个应当进基，x_4，x_5中哪一个应当离基？计算新的一对基变量并求新角的价值。

练习8.2.2 作完第一步后，准备并实现下一步。

表

单纯形法的每一步，都包括对矩阵行做出决策和进行运算两个方面：需要选择进基变量和离基变量，并且实现这种进基和离基运算。组织实施此过程的方法之一就是将数据放入一个称为表的较大矩阵中。为了讲清所有这些运算，我们首先用价值公式（以及只有最优角才满足之过程终止准则公式）所含之矩阵的术语来实现这些运算。给定矩阵A，右侧b和价值向量c，从而原始表具有形式

$$T=\begin{bmatrix} A & \vdots & b \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ c & \vdots & 0 \end{bmatrix}^{*}.$$

此为$(m+1)\times(m+n+1)$阶矩阵。在其这种形式中，基变量容易与其它变量相混淆。所以，第一步在于使每一行中都留有一个基变量，之后，做出决策便来得非常容易。假设，x_1，x_2，…，x_m为基变量（必要时可以重新编号），而其余n个变量为自由变量。这时，矩阵A的前m列组成一个方阵B（此角之基矩阵），其余的n列给出一个$m\times n$阶矩阵F。同理，价值向量c分解成$[c_B, c_F]$，而向量x则为$[x_B^T, x_F^T]^T$。此过程之要点在于此角中$x_F=0$，方程$Ax=b$变为$Bx_B=b$，由此得到基变量x_B。这样，价值等于$cx=c_Bx_B$。

* 从此以后，向量c用行向量表示，不再加转置符号T。 译者注

为对此表进行处理，我们设想将其分成方格：

$$T=\left[\begin{array}{c:c:c} B & F & b \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots \\ c_B & c_F & 0 \end{array}\right].$$

我们若能以单位矩阵代替矩阵B，则其变量即将被分开。这一点通过行变换便可达到。结果，我们得到：

$$T'=\left[\begin{array}{c:c:c} I & B^{-1}F & B^{-1}b \\ \cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \\ c_B & c_F & 0 \end{array}\right].$$

自然，把B变成I的矩阵乃是B^{-1}，不过任何地方B^{-1}都不明显地表现出来。因此，所有从他行减去某行的减法，总括起来便等价于乘以B^{-1}（事实上，我们这里进行的乃是高斯-若当法的一个步骤，此步骤与11后面所描述的颇为相似，主元素通过本身相除的办法来消除，从而在对角线上留下的是1，而其上方和下方得到的都是零）。为了完成制表任务，我们用这些单位主元，使其底部的一行也变成零，眼下此行为向量c_B所占据，为此，第一行乘以c_1再由后一行减之，随后，第二行乘以c_2，如此等等，即c_B乘以矩阵之上面一部分，并由下面一部分减之：

$$T''=\left[\begin{array}{c:c:c} I & B^{-1}F & B^{-1}b \\ \cdots & \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots & \cdots\cdots\cdots\cdots \\ 0 & c-c_{FB}B^{-1}F & -c_BB^{-1}b \end{array}\right].$$

制表过程就此结束，所剩工作只是对其给以正确的解释。当初，我们的问题在于在$x\geqslant 0$，$Ax=b$的条件下极小化cx，方程$Ax=b$曾经乘以B^{-1}，结果得到：

$$x_B+B^{-1}Fx_F=B^{-1}b \tag{1}$$

且价值 $cx=c_Bx_B+c_Fx_F$变为

$$cx=(c_F-c_BB^{-1}F)x_F+c_BB^{-1}b \tag{2}$$

重要的是表中包含了所有需要的量。右面基变量$x_B=B^{-1}b$（自由变量$x_F=0$）。当前的价值$cx=c_BB^{-1}b$，位于右下方并带有负号。并且，最重要的是，目测下面一行中间的价值，我们便可确定，该角是否为最优者。若其任一元素为负的，则价值可能下

降。若其所有系数均为正值抑或为零，则任何变化只能使价值上升，于是最优角就此得到了。这就是**终止准则**或**最优性条件**：

8B 如果 $r=c_F-c_BB^{-1}F$ 为非负向量，那么，降低价值是不可能的；角已为最优者。且极小价值为$c_BB^{-1}b$。因此，条件 $r\geqslant 0$ 乃是单纯形法之终止准则。若此条件不满足，则向量 r 每一个负分量都对应一条可使沿其方向价值下降的棱边，而通常的策略在于选择向量 r 中其模最大之负分量。

如果按此规则，选就向量 r 之第 i 个分量，那么，原角不是最优角。向量x_F第 i 个分量（譬如α）将由负变为正。需要回答的问题是，此分量能够变大到怎样程度。我们曾经解决了，什么样的自由变量要变为基变量的问题，而我们现在应当决定，基变量中什么样的分量应当变为自由变量。增大α时，向量x_B的某些分量可能开始减小，于是，在向量x_B的某一分量等于零时，我们就到达了下一个角。正是这个分量（比如说，第k个分量）要变为自由变量。在这一点我们行将得到一个既是容许的又是基本的新向量 x。它之所以是容许的，因为依旧成立 $x\geqslant 0$；所以是基本的，因为它仍有 n 个零分量。此时，向量x_F的第 i 个分量已经由零变到α，将取代向量x_B的第k个分量，该分量已变为零。向量x_B的其它分量也将变化，但仍将为正。

8C 假设按照8B之规则，F 的第 i 列——我们以u表示——使其由自由变量变为基变量。那么，在新角 x 上其它分量等于：

$$\alpha=\min\frac{(B^{-1}b)_j}{(B^{-1}u)_j}=\frac{(B^{-1}b)_k}{(B^{-1}u)_k}. \tag{3}$$

极小只是针对向量 $B^{-1}u$ 的正分量取的。若无正分量，则下一个角将位于无穷远处，且价值可能无限减小，其极小值为$-\infty$。否则，矩阵 B 的原第 k 列将被新列 u 所取代，于是单纯形法又将在新的角上开始。

列向量$B^{-1}b$和$B^{-1}u$在最终的表中是存在的（$B^{-1}u$为矩阵 $B^{-1}F$ 之一列，位于下面一行 r 中之最负元素的紧上方）。所以比值可立

即计算出来。

例 前面我们已经讨论过的示例，若价值函数的形式为$x+y$，约束为 $x+2y-u=6$，$2x+y-v=6$，则最初表格形式为

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & -1 & 0 & 6 \\ 2 & 1 & 0 & -1 & 6 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

如果，我们从图8.4中直线 $x=0$ 与$2x+y=6$ 相交（等价于$v=0$）处三角P点开始，那么所剩的二变量y和u将为基变量。为形式统一起见，我们将第一列与第三列交换位置，此后，向量u将移至x处：

$$T=\left(\begin{array}{cc:cc:c} -1 & 2 & 1 & 0 & 6 \\ 0 & 1 & 2 & -1 & 6 \\ \hdashline 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \end{array}\right).$$

为了消元，我们将第一行乘以-1，以得到单位主元。然后，利用第二行，在第二列产生零：

$$T''=\left(\begin{array}{cc:cc:c} 1 & 0 & 3 & -2 & 6 \\ 0 & 1 & 2 & -1 & 6 \\ \hdashline 0 & 0 & -1 & 1 & -6 \end{array}\right).$$

我们首先来看下面一行中的$r=[-1, 1]$。它有一负分量，所以现行角$u=y=6$，及现行价值$+6$不是最优的。负分量在第三列，故x之第三个变量将进基。此负分量所对应的上面的列为$B^{-1}u=\begin{bmatrix} 3 \\ 2 \end{bmatrix}$且与最后一列的比等6/3和6/2。因为第一个比值较小，故u之第一个未知数（即表之第一列）将离基。

在新表中，我们把第一列和第三列交换一下位置，根据消元法分出主元后得：

$$\left(\begin{array}{cc:cc:c} 3 & 0 & 1 & -2 & 6 \\ 2 & 1 & 0 & -1 & 6 \\ \hdashline -1 & 0 & 0 & 1 & -6 \end{array}\right) \longrightarrow$$

$$\left(\begin{array}{cc:cc:c} 1 & 0 & \frac{1}{3} & -\frac{2}{3} & 2 \\ 0 & 1 & -\frac{2}{3} & \frac{1}{3} & 2 \\ \hdashline 0 & 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & -4 \end{array}\right).$$

现在，$r=\left[\frac{1}{3}, \frac{1}{3}\right]$为正，终止准则已经满足。故角$x=y=2$及相应的价值$+4$将是最优的。

练习8.2.3 假设原价值函数的形式为$3x+y$，在重新安排之后，角P处$c=(0, 1, 3, 0)$。证明$r\geqslant 0$。从而该角为最优角。

练习8.2.4 假设原价值函数的形式为$x-y$，重新安排之后，在角P处$c=(0, -1, 1, 0)$，计算r并确定哪一个u列应当进基。然后计算$B^{-1}u$并根据其符号证明将永远也不会再遇到其它角。我们正沿着y轴上升（参看图8.4）且量$x-y$将趋向$-\infty$。

练习8.2.5 在同一例子中，只改变价值函数为$x+3y$，验证，单纯形法将使我们从P点到Q点再到R点，而角R是最优的。

练习8.2.6 单纯形法的第一个阶段，在于求出方程组$Ax=b$的一个基本容许解。改变符号，使得$b\geqslant 0$之后，在条件$x\geqslant 0$，$w\geqslant 0$，$Ax+w=b$下，附加的极小化$w_1+\cdots+w_m$之问题。如果方程组$Ax=b$有非负解，那么，此问题的极小价值将等于零，即$w^*=0$。

a) 证明，对此新问题，角$x=0$，$w=b$既是基本角又是容许

角。所以此问题之第一个阶段已经完成。于是，单纯形法便可着手求最优对x^*、w^*。若$w^*=0$，则x^*即为原问题要求之角。

b) 对于$A=(1\ \ -1)$和$b=(3)$，写出附加问题，由上述a)点写出该问题第一个阶段之向量以及最优向量。求容许集$x_1-x_2=3$，$x_1\geqslant 0$，$x_2\geqslant 0$之角，并且绘出该集合。

练习8.2.7 如果我们想极大化，而不是极小化价值函数，(仍然对于$Ax=b$和$x\geqslant 0$)那么，对于r终止准则将是什么？应按何规则在矩阵F中选出基列，在矩阵B中选出自由列？

练习8.2.8 在条件$x_1+x_2\geqslant 4$，$x_1+3x_2\geqslant 12$，$x_1-x_2\geqslant 0$，$x_1\geqslant 0$，$x_2\geqslant 0$下，极小化$2x_1+x_2$。

单纯形法步骤的组织

我们已经实现了由单纯形法之几何到其代数之过渡，即由"角"的语言过渡到了"基本容许解"。过渡之后，计算才能开始。现在，我们知道起决定性作用的乃是向量r和比值α。我们想再回到它们的计算上来。这是单纯形法之核心，它可以用三种不同的方法组织实施：

(1)列表

(2)每当矩阵F之新的第i列u取代矩阵B的现行第k列时，计算B^{-1}并更新其值。

(3)计算$B=LU$或$B=QR$，并更新这些因子代替B^{-1}。

这个清单实则是单纯形法之简史。引人入胜的为第一阶段，即曾于多年占据统治地位之列表法。对我们大多数人来说，它给线性规划带来过一种神秘的气氛，主要是因为它几乎完全避免了矩阵的表示法(用巧妙的手法把所有矩阵都完整地写出来了！)。然而从计算的角度来看，列表法的黄金时代已经结束(教科书中之简单问题除外)。

问题在于，计算了向量r且其模最大的负分量告诉我们相应列将进基之后，r上方的其余诸列无一被采用。这些计算纯属浪费时

间。在大型的问题中，成千上百倒反复计算逐个等待进基。这样精细的进行全部消元运算，理论上是严格的，但在实际上是不适当的。

列表方法的描述该结束了。仅仅研究一下单纯形法并且搞清什么计算乃是必不可少的，那要迅速得多，到头来要简单得多。在每一步我们都应当把矩阵 F 的某一列和矩阵 B 的一列重排，并根据 r 和 α 决定，究竟哪些列应当选来交换位置。这一步要求如下运算周期，从现行基矩阵 B 和现行解 $x_B=B^{-1}b$ 开始：

表8.1　单纯形法之一步

1）　计算行向量 $\lambda=c_BB^{-1}$ 和向量 $r=c_F-\lambda F$。

2）　如果 $r\geqslant0$，则过程结束，现行解即为最优解；否则，若 r_i 为向量 r 中其模最大之负分量，则选矩阵 F 的第 i 列进基，我们以 u 表示之。

3）　计算 $v=B^{-1}u$。

4）　计算 $B^{-1}b$ 对 $B^{-1}u$ 的正分量之诸比值。若 $B^{-1}u$ 无正分量，则极小值为 $-\infty$；如果最小比值发生在第 k 个分量上，那么现行矩阵 B 的第 k 列将被取代。

5）　更新矩阵 B（或 B^{-1}）和解 $x_B=B^{-1}b$。并至此再返回第一点。

此方法，有时称为修正单纯形法，以区别于列表演算。事实上，这就是单纯形法只不过是经过了压缩而已。为了完成此项讨论，尚应解决第一步、第三步和第五步该如何实现的问题，即计算

$$\lambda=c_BB^{-1},\ v=B^{-1}u,\ x_B=B^{-1}b。\qquad(4)$$

在编写本书的时候，最常用的方法乃是直接对矩阵 B^{-1} 进行计算，即根据矩阵 B 中取自初始角的基列以显示将其计算出来。这样，在以后之诸角中，计算过程将很简单。我们把新向量 $B^{-1}u$ 放入表之第 k 列（欲消除列），此后，用消元法把相应矩阵化为单位矩阵：

$$E=\begin{pmatrix} 1 & & \vdots & & \\ & \ddots & \vdots & & \\ & & B^{-1}u & & \\ & & \vdots & \ddots & \\ & & \vdots & & 1 \end{pmatrix} \Longrightarrow \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & 1 \end{pmatrix}=I. \qquad (5)$$

自然，起变换作用之矩阵为E^{-1}。在单纯形中第一个角的矩阵B^{-1}计算出后，每一个后继之角即用左乘以E^{-1}*的方法求得。

勿需真正改变矩阵B^{-1}，只要把简单的矩阵E^{-1}存储起来，即足可达到目的。而后，这些E^{-1}矩阵就顺序地应用于给定的向量c_B、u和b，但不应用于矩阵的所有列。此即称为"逆矩阵的乘积形式"。繁琐的、周期性的对当前矩阵B重新求逆便可避免，这时，保留在矩阵E^{-1}中的信息，即可清除。

一种新的作法在于利用线性代数的通常方法。如果把(4)看作具有同一个系数矩阵B的三个方程：

$$\lambda B=c_B, \qquad Bv=u, \qquad Bx_B=b. \qquad (6)$$

那么，标准分解$B=QR$或$B=LU$（或$PB=LU$，这里为了提高数值的稳定性，可以进行行交换），将立即给出三个解。在Luenberger的著作中(参考文献目录)**讲解了怎样才能避免重复计算这些因子。

尚有一个问题需要回答，单纯形法我们要作多少步？这是一个无法预先回答的问题。经验表明单纯形法只涉及到大约m个不同的角，即约运算m^2n次，此运算工作量与$Ax=b$之通常消元法的工作量相似，这也是单纯形法成功的原因。但是，数学计算表明，计算路径的长度不总局限于m的任一固定倍数或m的任一固定幂次。现在知道，最坏的容许集可使计算路程长达$cm^{n/2}$条棱边以上，其中数c不依赖于m。因为某种关于多维多面体的几何性质的理由，单纯形法看来还是走运的。

练习8.2.9 验证，如果

* 此矩阵在练习8.2.9中已经求得，它就像E那样简单。

** "线性与非线性规划引论"D.G.Luenberger夏尊铨等译，科学出版社(1980)

$$E=\begin{pmatrix} 1 & & v_1 & & \\ & \ddots & \vdots & & \\ & & v_k & & \\ & & \vdots & \ddots & \\ & & v_n & & 1 \end{pmatrix}.$$

则

$$E^{-1}=\begin{pmatrix} 1 & & -v_1/v_k & & \\ & \ddots & \vdots & & \\ & & 1/v_k & & \\ & & \vdots & \ddots & \\ & & -v_n/v_k & & 1 \end{pmatrix}.$$

练习8.2.10 对任一矩阵 B，求证乘积BE除其第 k 列已变成 Bv（等于所求向量 u）以外，与 B 是等同的，因此，BE实际是下一步的基矩阵 B，其逆$(BE)^{-1}=E^{-1}B^{-1}$，且因子E^{-1}正确无误地修正逆矩阵。

§8.3 对偶理论

第二章开始我们谈到，虽然消元法给出了线性方程组$Ax=b$的一种解法，但是另一种更深入的理解也是可能的。对于线性规划亦正是如此。单纯形法之技巧可以解线性规划，但是，线性规划理论的核心，实际上是对偶性。这是一个优秀的思想。同时，对于应用来说，对偶性也是十分基本的东西。现在让我们来讲述对它的理解。

我们从标准问题开始：在$x\geqslant 0$和$Ax\geqslant b$的条件下，极小化 cx。

但现在不产生以等式代替不等式之等价问题，对偶理论产生一个完全不同的问题。对偶问题，从同样的A。b 和 c 开始，但此后全部工作都反其道而行之。在原问题中，c 曾为价值函数的系数，b 为限制条件，在对偶问题中，此两向量交换位置。此外，不等式改变符号，新未知数组成行向量 y，故容许向量将满足 $yA\leqslant c$，

而非$Ax \geqslant b$了。最后，我们将极大化取代极小化。唯一不变的东西乃是对于非负的要求，包含m个分量的未知向量y应满足条件$y \geqslant 0$。简言之，极小问题之对偶问题为极大问题：

极大化　　yb

条件　　　$yA \leqslant c$,

　　　　　$y \geqslant 0$。

此问题之对偶为原极小化问题*。

显然，对所有这些"反化"，笔者应给予某些解释。它们隐藏了"极小化者"与"极大化者"之间的某种竞争。回头再来看饮食问题，我们即可把这些"反化"解释得最清楚。希望诸位再次跟踪一下此问题的全过程。极小化问题有n个未知数，代表着其需求量为x_1，…，x_n（非负值）的n种不同的食品。m个约束条件代表m种需求的维生素，而不再是先前问题中对蛋白质需求量的单一种约束。元素a_{ij}为第i种维生素在第j种食品中的含量，方程组$Ax \geqslant b$的第i行表示每餐不少于b_i的该种维生素。最后，若c_j为第j种食品的价值，则$c_1x_1 + \cdots + c_nx_n = cx$为整餐的价值。极小化这个价值即为原问题的目的。

在对偶问题中，药房出售维生素片，而非食品。维生素之价格非负，并且是可以调整的。这里主要约束在于，药房老板对维生素的索价，不能高于相应数量食品的价格。因为第j种食品包含的维生素量为a_{ij}，故药房老板对当量维生素的定价（即$a_{1j}y_1 + \cdots + a_{mj}y_m$）不能超过该食品的价格$c_j$。这就给出了约束条件$yA \leqslant c$。在此约束下，药房老板可出售总量为$b_j$的每种维生素，总收入为$y_1b_1 + \cdots + y_mb_m = yb$，这就是欲使之极大化的目标函数。

应当指出，此两问题的容许集是截然不同的。第一个容许集为空间R^n之子集，被矩阵A和约束向量b所限定；第二个容许集为空间R^m的子集，被A之转置矩阵与另一向量c所决定。然而，在引入

---

* 此两问题完全对称。我们是由极小化开始的，但单纯形法也可以同样用于极大化问题，此两问题，在任何情况下均可立即求解。

价值函数时，此两问题都包含相同的输入数据A，b和c。整个线性规划理论都是建筑在它们之间的关系上的，所以，我们直接得到了最基本的结果：

8D 对偶定理 若原问题有解，则其对偶问题亦有解，反之亦然。此两解之值是相同的：cx的极小值等于yb的极大值。否则，若最优向量不存在，则或两容许集均为空集，或一为空集，另一问题有无界解（极大值为$+\infty$，或极小值为$-\infty$）。

如果两容许集均非空集，那么，这是第一种情况，也是最重要的情况：$cx^*=y^*b$。

从数学上讲，这一事实消除了药店老板与食品店老板之间的竞争：因为结果永远是平局。这里我们将得到类似于对策论中之"极小极大定理"和平衡。这些定理并不意味着，顾客对最优一餐无所支付，或矩阵对策向两参加者提供完全对等的机会。它们却意味着，尽管药店老板保证对每种食品均可提供代用药品，甚至保证以较低的价格出售象花生油之类贵重食品的代用品的情况下，顾客亦无经济理由在维生素与食品之间的选择中倾向于维生素。我们将证明，贵重食品不进入最优一餐食物之中，结果仍将为平局。

此结论看来可能为一僵局，但是希望诸位切莫上当。要知道，正是最优向量包含着决定性的信息。原问题中，x^*为买主提示策略，在对偶问题中，向量y^*固定市场经济的自然价格（或"影子价格"），就我们的线性模型反映着现实经济论，这些向量代表了真正要采取的决策，它们仍需通过单纯形法求得，而对偶定理只不过会告诉我们其最重要的性质而已。

现在让我们来着手证明这一定理。在某种意义上，证明可能是显然的，药房老板可将其药品价格提高至与食品店老板的食品定价相应的程度，但实则不然。更确切点说，只有前半部分是正确的：因为每种单一食品可被其当量维生素所取代，价值并不增加，故适量食品的每餐必须至少与药店老板任一餐的维生素当量等价。这仅是一个单侧不等式，药店老板索价≤食品店老板索价，但它都是最

基本的东西。我们称其为弱对偶，并且对于任何线性规划及其对偶问题，都是很容易证明的：

8E 若 x 和 y 分别为极小与极大问题之容许向量，则

$$yb \leqslant cx。$$

证 上述向量是容许的，故它们满足不等式

$$Ax \geqslant b \quad 和 \quad yA \leqslant c。$$

此外，由容许性也意味着不等式$x \geqslant 0$和$y \geqslant 0$成立，故我们可取标量积，而不致破坏不等式的符号：

$$yAx \geqslant yb \quad 和 \quad yAx \leqslant cx \qquad (7)$$

此两不等式的左侧是相同的，故得弱对偶

$$yb \leqslant cx。$$

此单侧不等式用起来是容易的。首先，它杜绝了两个问题为无界解之可能性：如果yb的值任意大的话，则甚至连容许向量 x 都不可能存在，否则，与不等式$yb \leqslant cx$是相矛盾的。同理，若原问题是无界的，即价值cx可减小至$-\infty$，则其对偶问题不可能有容许向量 y。

其次，同等重要的一点是，达成等式$yb = cx$之任何向量，均必然为最优向量。在这种情况下，食品店老板之索价与药店老板之索价是相等的，根据顾客无需选择这一事实，我们可以辨认出这是最优餐价和最优维生素价：

8F 若 x 和 y 为容许向量，且$cx = yb$，则这些向量必定为最优者。

证明：根据8E我们知道，任何容许向量 y 均不能使yb大于cx。因为我们所讨论的向量 y 达到了这个数值，故此 y 为最优向量。同理，任何容许向量 x，均不能使cx值小于yb，于是，达到此最小值之任何 x 均必为最优者。

我们举一个例子，有两种食品和两种维生素：

原问题	对偶问题
极小化$x_1 + 4x_2$	极大化$6y_1 + 7y_2$
条件：$x_1 \geqslant 0$，$x_2 \geqslant 0$，	条件：$y_1 \geqslant 0$，$y_2 \geqslant 0$，

$$2x_1+x_2\geqslant 6, \qquad 2y_1+5y_2\leqslant 1,$$
$$5x_1+3x_2\geqslant 7。\qquad y_1+3y_2\leqslant 4。$$

$x_1=3$和$x_2=0$之选择是可行的，得价值$x_1+4x_2=3$。在对偶问题中，$y_1=\frac{1}{2}$，$y_2=0$。给出同样的数值$6y_1+7y_2=3$。因此，这些向量必定是最优的。

所有这些，看起来似乎异常简单，然而却值得我们仔细研究找出，当不等式$yb\leqslant cx$变成等式时，究竟发生了什么事情。这颇似微分运算中的情况，人人皆知函数为极大或极小的条件仍是一阶导数等于0，然而，人们却常常忘记，在有限制的情况下，此条件会完全改变。最好的例子便是一条向上倾斜的直线，其导数永不为0，微分运算几乎是无济于事的，但在此区间之最右端肯定会有最大值。这与我们在线性规划中所遇到的情况完全一致。尽管这里有更多的变量，通常的区间被多维的容许集所取代，但极大值总是可以在容许集之某一角上找到的。用单纯形法之语言讲，那就是，有一个最优基向量x，它只有m个非0分量。

线性规划中的现实问题在于决定哪一个为最优角。为此，我们必须承认，微分运算并非完全无济于事。而且远非如此，因为“拉格朗日乘数”法将使我们回到极大极小点的0导数上来，而诸对偶变量y实际上恰好是极小化cx问题的拉格朗日乘数。此法也是非线性规划的关键，但我们并不拟涉及此问题，因为它超出了所讨论问题的范围。约束极大极小的条件将在等式(8)中以数学形式给出，但是首先我们想以经济的术语表达出来：在下列情况下，营养餐x和维生素价格y是最优的。

(i)食品店老板不销售超过其维生素当量价格之任何食品；

(ii)对营养餐中过量之任何维生素，药店老板之索价为0。

在此例中，$x_2=0$，因为第二种食品过于昂贵：其价格超过了药店老板之索价，因为$y_1+3y_2\leqslant 4$变成了严格不等式$\frac{1}{2}+0<4$。同理，若第i种维生素过量，则$y_i=0$；这是“免费”的，就是说，它是不值钱的。此例中，我们曾要求7个单位的第二种维生素，但

这一份营养餐却提供了$5x_1+3x_2=15$，故由此得$y_2=0$。读者可以看出，对偶问题为何变得完整起来了；仅仅在此两个条件都满足的情况下，我们才能得到一个最优对。

这些条件，如以矩阵形式表达出来，则将很容易理解。我们把向量Ax与向量b相比较（记住，容许条件为$Ax\geqslant b$），并寻找等式不成立的那些分量。这对应于一种过量的维生素，故其价格为$y_i=0$。同理，把y_A与c相比较，并期望所有严格不等式（昂贵食品）对应于$x_j=0$（由此营养餐中排除）。这就是线性规划中的“互补松弛条件”及非线性规划中的“Kuhn-Tucker条件”。

8G 平衡定理 设容许向量x和y满足下列互补松弛条件：

$$若(Ax)_i>b_i，则y_i=0，若(y^A)_j<c_j，则x_j=0 \qquad (8)$$

那么，x和y为最优向量。反之，最优向量必须满足条件(8)。

证明 关键方程为

$$yb=y(Ax)=(y_A)x=cx \qquad (9)$$

在正常情况下，只有中间的等式，才是确定无疑的。在第一个等式中，我们确知，$y\geqslant 0$和$Ax\geqslant b$，因此，$yb\leqslant y(Ax)$。此外，只在一种情况下，等式才能成立：只要发生不等式$b_i<(Ax)_i$，则与这些分量相乘之因子y_i必然为0。这时，它对于内积没有贡献，故等式得以保持。

对于其余等式来说，情况也是这样：容许条件给出$x\geqslant 0$和$yA\leqslant c$，由此可得不等式$yAx\leqslant cx$。只有当第二个松驰条件满足时，我们才得到等式，若有不容许价格存在的话，即$(y_A)_j<c_j$，则必须通过将此不等式乘以$x_j=0$的办法予以消除。结果在关键方程(9)中，我们得等式$yb=cx$，保证x和y之最优性者，正是此等式（且此等式亦由x和y的最优性所保证）。

关于单侧不等式$yb\leqslant cx$，我们就谈这些。其证明是很容易的。它曾给了我们一个快速检验最优向量的方程（这些向量把不等式变成等式），最后，它给了我们一组必要和充分的松弛条件。它唯一尚未做的便是证明等式$yb=cx$为实际可能的。在最优向量真正产生

之前（而这一点并非几个简单的步骤即能做到的），对偶定理不算完成。

为获得最优向量，我们回到单纯形法——我们已经会用此法来求最优向量x。问题在于同时求出最优向量y，从而表明，尽管单纯形法是为解原问题而构思出来的，但对于对偶问题，也能在恰当的地方终止。首先让我们来回顾一下，它是如何开始的。通过引入松弛变量$z=Ax-b$并将容许条件改写成

$$[A\ -I]\begin{bmatrix} x \\ w \end{bmatrix}=b,\quad \begin{bmatrix} x \\ w \end{bmatrix}\geqslant 0, \tag{10}$$

的办法我们即把m个不等式$Ax\geqslant b$变成了等式。然后此法的每一阶段都选取长方矩阵$[A\text{-}I]$的m列作为“基列”，并将它们（至少在理论上）左移。结果得矩阵$(B\ F)$，在扩大的价值向量$(c\ 0)$中之相应位移，把该向量变成了(c_Bc_F)。单纯形法之终止条件为$r=c_F-c_BB^{-1}F\geqslant 0$。

我们知道，此条件终究是要成立的，因为角的数目是有限的。此刻，价值函数等于

$$cX=(c_B\ \ c_F)\begin{bmatrix} B^{-1} & b \\ & 0 \end{bmatrix}=c_BB^{-1}b\text{——最小价值。} \tag{11}$$

如果在对偶问题中，我们能够选择$y=c_BB^{-1}$，那末，不言而喻，等式$yb=cx$就会成立；最小值与最大值相等。因此，需要证明，y满足对偶约束条件$yA\leqslant c$和$y\geqslant 0$，即

$$y[A-I]\leqslant(c\ \ 0)。 \tag{12}$$

在单纯形法中，当我们对矩阵$[A\ -I]$进行变换，以使基变量为初变量时，这就重新组合了约束条件，结果，这些条件便具有了

$$y(B\quad F)\leqslant(c_B\quad c_F) \tag{13}$$

的形式。在选取$y=c_BB^{-1}$时，这个约束条件之前半部分即变成等式，而后半部分则变为$c_BB^{-1}F\leqslant c_F$，这与终止条件$r\geqslant 0$是完全一致的，我们知道，此条件是满足的。因此，向量y是容许的，对偶定理于是证明完了。分离出相应的m阶矩阵B（根据预先假设，该

矩阵是非退化的）之后，单纯形法产生了最优向量x^*，亦产生了最优向量y^*。

练习8.3.1 求下述问题之对偶问题：在条件

$x_1 \geqslant 0$，$x_2 \geqslant 0$，$2x_1 \geqslant 4$，$x_1 + 3x_2 \geqslant 11$之下，极小化$x_1 + x_2$。
求此问题及其对偶问题之解，并计算出它们之共同值。

练习8.3.2 何为下述问题之对偶问题：在条件

$y_1 \geqslant 0$，$y_2 \geqslant 0$，$y_1 + y_2 \leqslant 3$之下，极大化y_2？求此问题及其对偶问题之解。

练习8.3.3 设A为单位矩阵（$m=n$），b和c为非负向量，试说明，在极小问题中，为什么$x^* = b$为最优向量，求极大问题之最优向量y^*，并验证此两值是相等的。若向量b之某些分量变为负值，那么，x^*和y^*会发生什么情况？

练习8.3.4 试举一一阶例题，其条件$Ax \geqslant b$，$x \geqslant 0$为非容许的，且其对偶问题为无界的。

练习8.3.5 对二阶矩阵$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$，选取向量$b$和$c$，使$Ax \geqslant b$，$x \geqslant 0$及$yA \leqslant c$，$y \geqslant 0$两容许集皆为空集。

练习8.3.6 若A、b与c中之所有元素均为正时，求证原问题及其对偶问题将自动成为容许的。

练习8.3.7 如果

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$b = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad c = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 3 \end{pmatrix},$$

求证$x=(1,1,1,0)$和$y=(1,1,0,1)$在通常对偶问题中为容许量。计算出cx和yb之后，说明何以得知其为最优向量。

练习8.3.8 验证上题之向量满足互补松弛条件(8)，求出原问题及其对偶问题中的松弛不等式。

练习8.3.9 设$A=\begin{bmatrix}1&0\\0&1\end{bmatrix}$，$b=\begin{bmatrix}1\\-1\end{bmatrix}$，$c=\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}$，求最优的$x$和$y$，并验证满足互补松弛条件（以及条件$yb=cx$）。

练习8.3.10 如果原问题之约束条件为等式而非不等式的话，即在$Ax=b$和$x\geqslant 0$的条件下极小化cx，那么，在对偶问题中，$y\geqslant 0$的要求即行取消；在$yA\leqslant c$之条件下极大化yb。求证，单侧不等式$yb\leqslant cx$依旧有效。为什么条件$y\geqslant 0$在(7)中是必须的，而这里则不然呢？

影子价格

在右侧b或价值向量c发生变化时，最低价值将如何变化呢？这是一个稳定性分析问题，它可使我们从单纯形法中挖掘出该法所包含之许多附加的信息。这些与**极限价值**有关的问题，对于经济学家或者公司领导者来说是至关重要的。

如果我们允许向量b和c有很大的变化，那么，最优解将发生跳跃式的变化。若蛋类涨价，则在一定的时刻，人们就会由营养餐中取消蛋品成份；用线性规划的语言来讲，即变量x_{egg}由基变量跳跃式地转变成自由变量。为研究此变化，必须引入所谓参数规划的概念。但是，如果象通常情况下那样，变化量并非很大的话，则最优角仍将最优；基变量依旧是原基变量。换言之，矩阵B和F不发生变化。从几何学上讲，这意味着，我们使容许集稍有移位（通过改变向量b）并使平面族倾斜一下，以把移位的情况考虑进去（改变向量c）；如果这些变化不大的话，则切割仍发生在原来的角中（但稍有位移）。

在应用单纯形法的末了，当基变量组已经明确时，矩阵A相应的m列将构成矩阵B。在此角中

$$最小价值 = c_B B^{-1} b = y^* b.$$

这样，位移Δb使最小价值产生$y^* \Delta b$之变化量。对偶问题之解y^*给出在向量b变化时最小价值的变化速度（即导数）。向量y^*的诸分量被称为影子价格，它起着很显然的作用。若对维生素B_1的需求量增加Δ，而其药店价格等于$y_1{}^*$，且药店老板完全有与食品老板竞争的能力，则（药店老板或食品老板）的营养餐价值将提高$y_1{}^*\Delta$。如果$y_1{}^*$等于0，那么，维生素B_1就是“免费的”，故其需求量之不大的变化，将无任何影响；营养餐对它的含量已经过量。

我们感兴趣的是另一个问题。假如我们需要营养餐中至少要包含有少量的蛋品，即非负条件$x_{egg} \geqslant 0$要变成$x_{egg} \geqslant \delta$。这将对价值产生什么影响呢？

若最优营养餐中已经包含有蛋品，则任何变化也不会发生，新的要求已经满足，故不引起附加的开销。但如原来并不含有蛋品成分，则加入其量为δ的蛋品，就要增加一定的开销。此增加值并不等于$c_{egg}\delta$之全价，因为我们可以减少其它食品的含量，节省下这部分费用。实际上，价值的增加取决于蛋品的**已减价值**——其本身价格，不包括我们为被蛋品所取代之较便宜的食品所付的价格。为计算此已减价值，让我们回到方程（2）：任一新的营养餐具有

$$价值 = (c_F - c_B B^{-1} F) x_F + c_B B^{-1} b = r x_F + c_B B^{-1} b。$$

若蛋品数量为第一自由变量，则向量x_F之第一分量增加δ，将使价值增加$r_1\delta$。因此，已减价值等于r_1。同理，向量r给出不为基变量的所有其它食品的已减价值，即当向量x（非负约束条件）之下边界向上移动时，总价值的变化量。我们知道，$r \geqslant 0$，因为此条件曾为终止准则。从经济角度来考虑，也会得到同样的结论，即蛋品的已减价值，不可能为负，因为，如果为负，那就意味着，营养餐在此前就已经包括了蛋类成份。

练习8.3.11　如果原问题有唯一的最优解x^*，且向量c稍有变化的话，那么，为什么此时x^*将仍为最优解？

练习8.3.12　若牛排价值c_1等于3美元，而花生油价值c_2等于

2 美元，它们分别提供 2 和 1 个单位的蛋白质(而要求 4 个单位)，那么，蛋白质的影子价格和花生油的已减价格等于多少？

不等式理论

对偶性可通过各式各样的方法来进行研究。我们前面采用的方法——证明$yb\leqslant cx$，然后通过单纯形法求得等式——曾经是很方便的，因为在此以前单纯形法已经建立起来了。但其证明很长。当然，这也曾给的是一个**构造性**的证明，实际上已经求出了最优向量x^*和y^*。现在让我们来简述一下另一方法。这里用的不是单纯形算法，而是几何概念。笔者认为，如果我们不谈某些细节的话，其关键思想将同样是清楚的（实际上或许更清楚）。

此方法的最好解释，来自线性代数的基本定理。我们提醒一下，第二章的问题在于解方程组$Ax=b$，换言之，即在矩阵A的列空间求向量b。消元法之后，也在研究了四个基本子空间之后，方程组的可解性问题在练习2.5.11中以一种完全不同的方式得到了解答：

8H 或方程$Ax=b$有解，或存在某个使$yA=0$，$yb\neq 0$的向量y。

这就是**二择一定理**，因为同时求出x和y是不可能的：若$Ax=b$，则$yAx=yb\neq 0$；这与等式$yAx=ox=0$是相矛盾的。以子空间的术语讲，这意味着，或者b位于矩阵A的列空间中，或者它具有某个位于正交子空间中之非 0 分量，该子空间为矩阵A之**左核**。此分量便是所要求的向量y^*。

对于不等式，我们想找到一个完全相似的定理。为此，最合适的出发点仍然是方程组$Ax=b$，但要增加约束条件$x\geqslant 0$，即：什么时候方程组$Ax=b$不仅有解，而且有**非负解**？换句话说，具有等式约束条件之问题的容许集何时为非空集？

为回答此问题还得回到**可达向量**，即向量b之概念上来，对这

---

* 读者可以看到，此证明不是构造性的；我们只知道，该分量应该是存在的，否则向量b就该位于列空间中了。

些向量来说，方程组$Ax=b$是可解的。第二章曾经指出，在任意向量的情况下，向量Ax可能为矩阵A诸列的任意组合；若向量b位于列空间，则便是可达的。现在我们只允许非负组合，诸可达向量b已不再构成子空间，而构成图8.5所示之锥形区。对于一个$m\times n$阶矩阵来说，在m维空间中，应该有n列，锥即变成某种无底的棱锥。在图上，两维空间中画有四列，矩阵A为2×4阶。若向量b位于该锥内，则方程组$Ax=b$有非负解；否则即无这样的解。

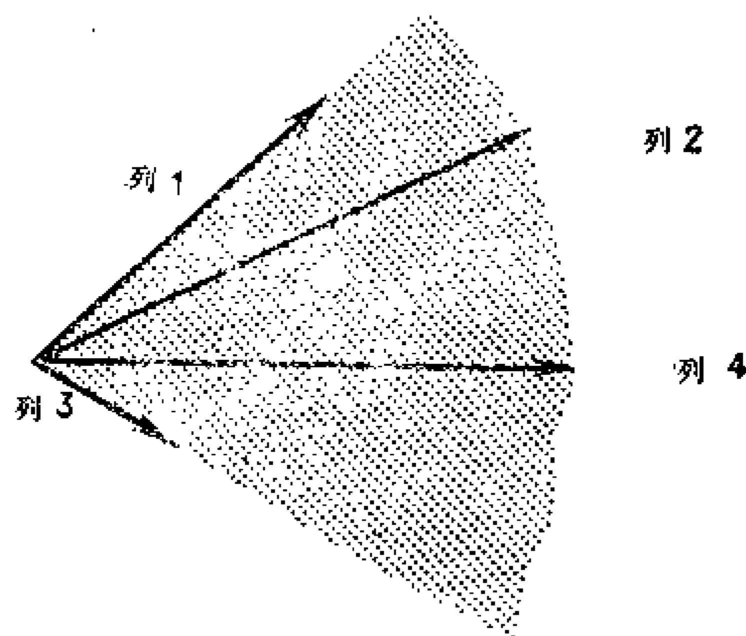


图 8.5 列之非负组合所构成的锥

我们的问题在于找出其另一方案：**若向量 b 位于锥之外，结果将如何？**这种情况示于图8.6中，其几何意义一目了然。有一个"分离超平面"，通过坐标原点，将向量b分在其一侧，而整个锥在另一侧（**"超"字**只不过用来强调维数可能较多；至于平面，与通常一样，由垂直于固定向量y的所有向量构成）。向量y和b的标量积为负，因为它们之间的张角大于90°，而向量y与矩阵A的任何一列的标量积为正。翻译成矩阵术语，这就是说，$yb<0$，而$yA\geqslant0$，这就是我们所寻找的**另一种可能情况**：

8I 或者方程组$Ax=b$有非负解，或者存在某向量y，使$yA\geqslant0$，$yb<0$。

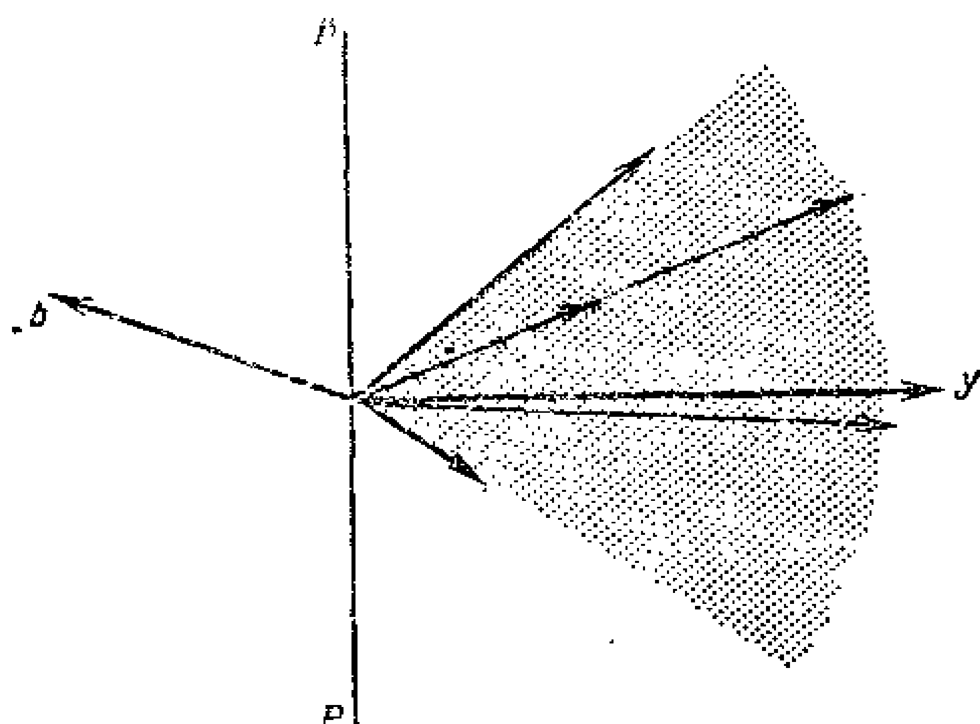


图 8.6 向量b位于圆锥之外且在分界平面之另一侧

这便是有关分离超平面的定理。对于数学经济来说，这是最基本的东西，其证明可在Gale有关线性经济模型理论的名著中找到。

例　若$A=I$，则其圆锥为正象限。此象限中之每一向量b，均为列向量的非负线性组合：

$$若\ b=\begin{bmatrix}2\\3\end{bmatrix}，则\ b=2\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}+3\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}。$$

对位于该象限外之任何向量b来说，第二种可能性应当实现：
若$b=\begin{bmatrix}2\\-3\end{bmatrix}$，则$y=\begin{bmatrix}0 & 1\end{bmatrix}$给出$yA\geqslant 0$，而$yb=-3$。

此定理会立即导致一系列的类似方案（参阅Gale一书）。其实，读者几乎得以相信，无论何时，只要两个方案互相排斥，其中必有一个是成立的。例如，子空间S及其正交补空间$S^{\perp}$不可能同时含有正向量，其数量积此时将为正值，而正交向量只能给出0数量积。另一方面，我们不敢肯定，或者S，或者$S^{\perp}$就应该包含有正向量：S可能为x轴，而$S^{\perp}$为y轴，在这种情况下，它们仅包含有"半正向量"$(1\quad 0)$和$(0\quad 1)$。值得注意的是，这个稍弱的二择一

确实是成立的：或者S包含有正向量x，或者$S^{\perp}$包含有半正向量y。当S和$S^{\perp}$为平面中之垂直直线时，显而易见，其中之一必定会通过第一象限；但这个问题在多维情况下，却不太清楚。

对于线性规划，最重要的二择一问题，是在约束条件为不等式，而不是等式的时候发生的：

8J 或者方程组$Ax\geqslant b$有非负解，或者存在某向量y，使$yA\geqslant 0$，$yb<0$，$y\leqslant 0$。

如果我们引入松弛变量$w=Ax-b$，以变不等式为等式：

$$[A\ -I]\begin{bmatrix} x \\ w \end{bmatrix}=b,$$

则很容易由8I得到8J。若不存在非负解，则根据8I，必定有这样一个向量y，使

$$y[A-I]\geqslant[0 \quad 0], \quad yb<0.$$

这正是8J中的第二种可能性，正是这个结果，导致了对偶定理之非构造性证明。但是，我们许诺过，要注意几何意义，而略去其代数细节，故我们要信守这一诺言。

练习8.3.13 若矩阵$A=\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$，描述其列所产生的圆锥。若向量$b$位于此锥内，譬如$b=(3,\ 2)^{T}$，求唯一的容许向量$x$。若$b$位于此圆锥之外，例如$b=(0,\ 1)^{T}$，试问，何向量$y$将满足第二种可能性？

练习8.3.14 在三维空间中，能否找到六个向量，其非负组合所构成的锥充满整个空间？

练习8.3.15 用8I证明，问题

$$\begin{bmatrix} 2 & 2 \\ 4 & 4 \end{bmatrix}x=\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

无解（因为第二种可能性是肯定的）。

练习8.3.16 用8I证明，问题

$$\begin{bmatrix} 1 & 3 & 5 \\ 1 & -4 & -7 \end{bmatrix}x=\begin{bmatrix} 2 \\ 3 \end{bmatrix}$$

无非负解（因为第二种可能性是肯定的）。

练习8.3.17 证明8J的两种可能性不能同时实现。

§8.4 网络模型

某些线性规划具有易于求解的结构。这种情况，在第一章解线性方程组$Ax=b$时，我们就已经遇到了，在那里，对于其非零元素都集中在主对角线周围的带状矩阵，使用消元法时，运算量的数量级由n^3减少为n。至于在线性规划中，我们将划分出专门的一类问题，即网络问题。在这里，矩阵A也含有大量零元素，而它的非零元素通常等于+1或−1（但是，对角线无从划分，因为矩阵是矩形的）。对于这些问题，消元法的步骤，只是做加法和乘法等简单运算。就是这样，也能解决比通常情况下要多的问题。但是，应当指出，在最坏的情况下，该方法的步数依旧可能按指数增长（参看：1978年1月《Scientific American》杂志上的一篇文章*），然而，像单纯形法计算那样，这是很少会成为危险的。

自然，只有问题本身很重要时，求解的高速率我们才感兴趣。网络问题在工业、经济规划的各个部门都有应用。例如用于货流、人流、气流、石油或水流的分配。我们可以货物转运问题为例：成品应当先分配给各仓库，由此再发往需求地，这一切均应使花费为最小。产地、仓库和需求地为网络的**结点**，而它们之间的路径称为**弧**。

图8.7中给出了这样一个模型，在图的每一弧上都标有其最大通过能力。问题在于得到一个从产地（结点1）到库存地（结点6）的最大可行流。箭头所示之流向是不能改变的，转运费用也不考虑。这是网络问题的一种个别情况，称之为**最大流问题**。

从结点i流向另一结点j的流量x_{ij}为未知量。尽管x是向量，

* H.R.Lewis. C. H. Papadimitriou
The Efficiency of Algorithms.Scientific American 302(1978),96-109.

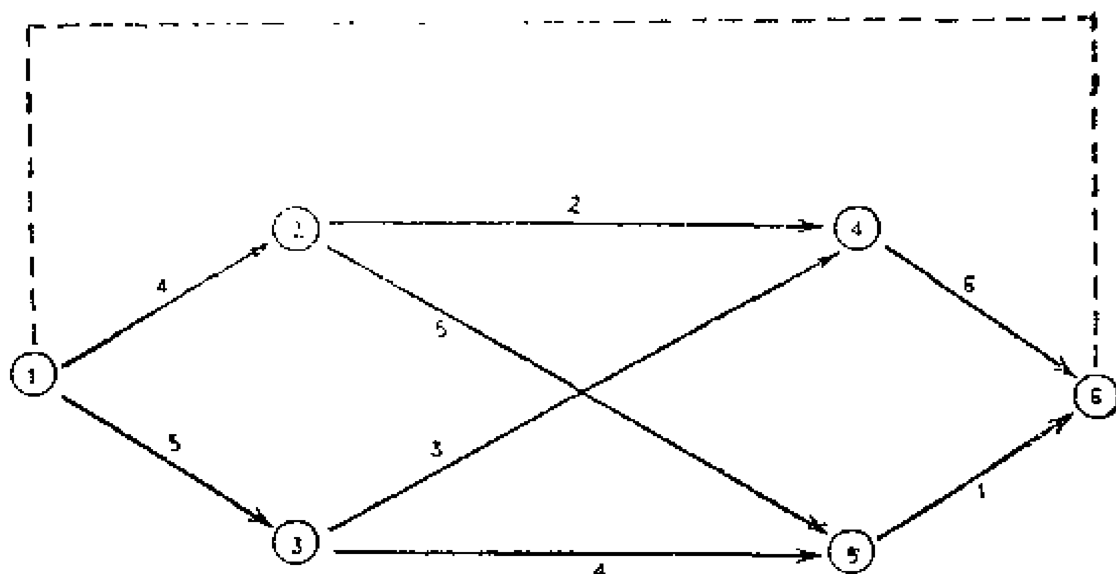


图 8.7 具有通过能力限制的系统

为了方便，我们还是采用了双下脚标表示法。不过，只考虑对应图上所示各弧的向量x_{12} x_{24}，…，x_{56}。如果这些弧的上限（通过能力）等于u_{ij}，那么单个流量的约束具有形式

$$0 \leqslant x_{ij} \leqslant u_{ij}{}^{*}$$

此外，对每个中间结点亦有约束，即进、出流量相等。如果我们设想一个通过能力为无限大的管道（在图上以虚线标出），并把全部货物由库存点再返运至产地，则此约束对于产地和库存点也是正确的。流入标号为 j 的结点的总流量，等于自所有 i 结点汇集而来的Σx_{ij}，而由第 j 个结点流向所有 k 结点的总流量等于 Σx_{jk}。所以，平衡约束为

$$\sum_{i} x_{ij} - \sum_{k} x_{jk} = 0, \quad j = 1, \ 2, \ \cdots, \ 6.$$

此方程的系数矩阵被称作**关联矩阵**，并具有一种特殊的结构。六个结点中的每一结点均对应该矩阵的一行，而九条弧中之每一条均对应于一列，+1和−1完全刻划了结点与弧之间的联系：

* 向量x的每个分量之上限和下限被称为"箱子"约束，由容许集的形状而得名，这些约束很简单，研究得也很深入。

$$
\begin{pmatrix}
1 & 1 & & & & & & & -1 \\
-1 & & 1 & 1 & & & & & \\
 & -1 & & & 1 & 1 & & & \\
 & & -1 & & -1 & & 1 & & \\
 & & & -1 & & -1 & & 1 & \\
 & & & & & & -1 & -1 & 1 \\
x_{12} & x_{13} & x_{24} & x_{25} & x_{34} & x_{35} & x_{46} & x_{56} & x_{61}
\end{pmatrix}。
$$

在最大流问题中，我们力图使x_{61}尽可能大，所以这是通常的线性规划问题（练习8.4.3），并且可以采用单纯形法求解。但是，我们想应用更为简练的方案。不用电子计算机，读者便可确定出最大流。因此，我们立刻转而研究，表明确为最大值而不可能再增大的条件。首先，我们引进网络的**截**的概念，截把所有结点劈为S和S'两组，S组包含发点，S组包含收点。我们把由S到S'所有弧的容量的和称为截的容量。

例如，如果S含有第一个和第三个结点，那么这个截的容量为$4+3+4=11$。比11还要大的流量是不可能的，因为它不可能通过该截。

8K 最小截最大流定理

网络的最大流等于最小截的容量。

证明 单侧不等式是显然的：对于任一流量和任一截，流量都不超过截的容量。任何流量最大不过于使与截相交的所有弧均达饱和的程度。各弧的总容量为流量的上界。这种情况，类似于**弱对偶**，即对所有容许向量x和y均满足的不等式$yb\leqslant cx$是容易的。这里也好，对偶定理也好，更加困难的问题在于证明不等式什么时候达到等式。

假设某一流量是最大的。我们来研究一下所有未饱和的弧。假设S包含发地，以及由此沿这些弧可达的所有结点。其余结点属于S'组。此时收点将位于S'内，因为不然，流量就不会是最大的。不仅如此，连接S与S'的每一条弧都是饱和的，否则，非饱和弧进入

的结点就会属于S组，而非S'组了。因此，流量真的充满一个截，于是等式成立了。

这使我们能够检验给定的流量是否为最大流，只需要求出相应的截就行了。在我们的例子中，最大流等于6，相应的截示于图8.8。

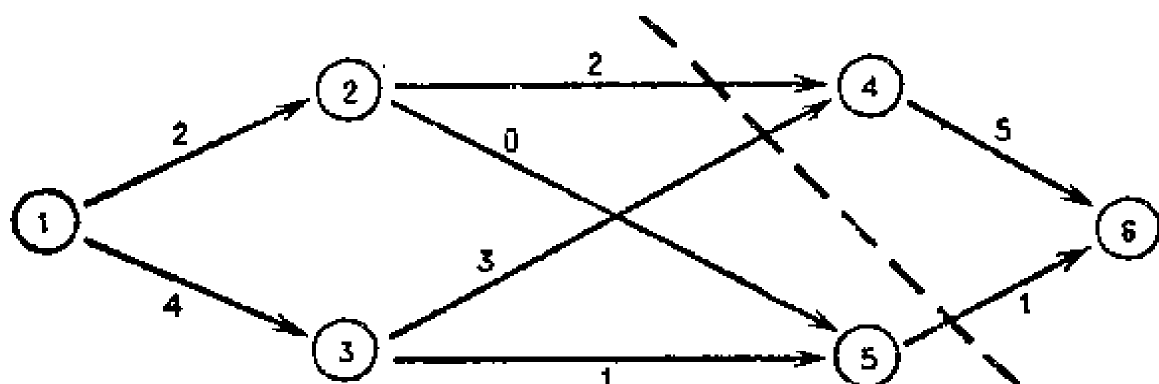


图 8.8 最大流和最小截

这个定理也给出了求最大流的一个算法：对于任意一个流，应该计算每条弧上未被利用的容量，如果沿着某条未饱和的路径可达收点，那么应该增加此路径的流量到最大可能，并且计算其结果。注意，如果发生由结点A到结点B的转运，则几乎全部货物可以返运回去，这样并不改变总流量的方向，换句话说，可以由结点B到达结点A。最大流应逐渐达到。在容量为整数的情况下，流量亦将为整数，即此问题属于**整数规划**范畴。

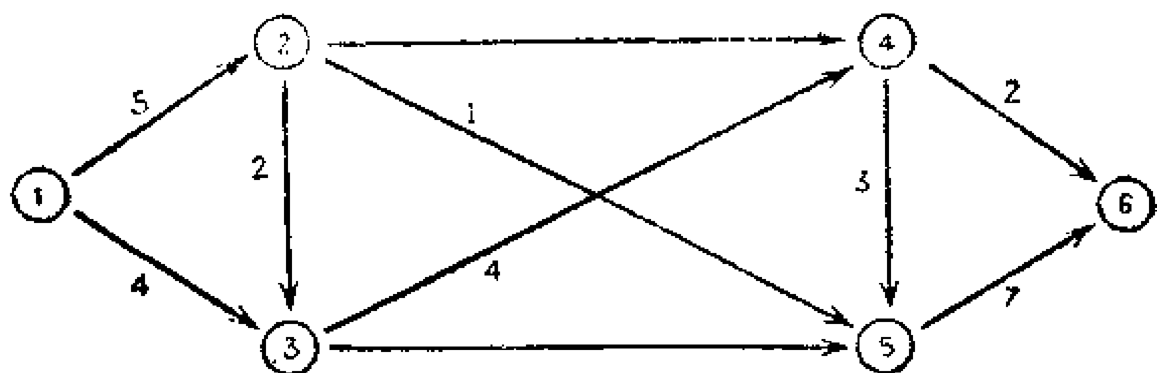
练习8.4.1 如果我们能够增加网络中某个管道的容量，那么应该选择什么管道以便得到最大流的最大增量？

练习8.4.2 求下图所示之网络的最大流和最小截。

练习8.4.3 在最大流问题中，引进松弛变量$w_{ij}=u_{ij}-x_{ij}$，在条件

$$\begin{bmatrix} A & O \\ I & I \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x \\ w \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} o \\ u \end{bmatrix},\quad \begin{bmatrix} x \\ w \end{bmatrix}\geqslant 0.$$

下，极大化x_{61}。与此对偶的问题包含六个未知量y_i和九个未知量z_{ij}。



$$\text{极小化}\quad \begin{bmatrix} y & z \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 \\ u \end{bmatrix} = zu.$$

满足条件

$$(y \quad z)\begin{bmatrix} A & O \\ I & I \end{bmatrix} \geqslant (0, \cdots, 1, 0)$$

对与最小截相交的各弧选择$z_{ij}=1$，对其余的选择$z_{ij}=0$，S中的结点$y_i=0$，S'中的结点$y_i=1$，求证上述选择是可行的同时也是最优的。

简单的指派问题

假设我们有m个人n项工作。其中每一个人只能完成其中某几项工作。能否按专长把工作指派给大家，同时不同的人不派同一个工作呢？

不难求出可能实施这种指派的必要条件。第一，每一个人至少应有一个专长，第二，每两个人应有两种不同的专长。并且每三个（或k个）人一组应该有能力完成三项（或k项）不同的工作。显然，不这样，目的是不可能达到的。问题在于证明，如果每一组都满足前面列举必要条件，则分工是可能实现的。

81. 当且仅当每一组均能完成充分多数量的工作，并且若一组由k个人组成，则他们至少能够共同完成k项工作时，指派才有可能实现。

乍看起来，这个条件要求过低，因为一个技能很高明的人能够帮助全组人员来满足这个条件。但是，要知道这个条件是适用于每一组的，其中也包括没有技能高明人员的那些小组。如果指派工作不可能实施，那么总能找到不满足这个条件的一组。

证明，从设计一个网络开始，此网络在每个人及其所能完成的工作之间具有容量m。之后，用容量为1的弧把人们与发点连起来，而把工作与收点连起来（图8.9）。结果若总流量等于m，那么起自发点的所有的弧将是饱和的，并且都有工作。

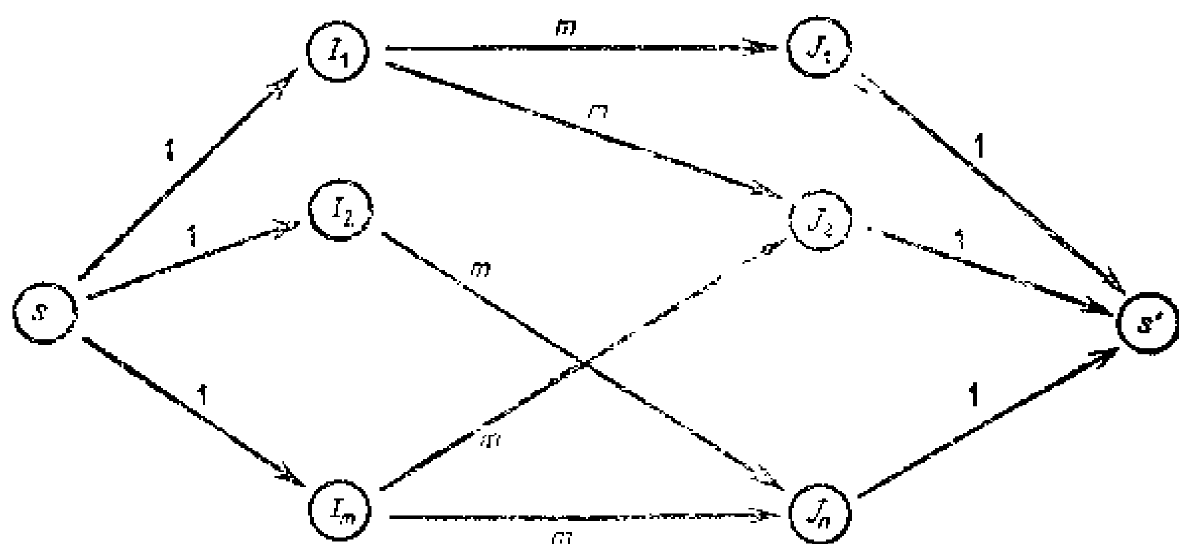


图 8.9 工作网络

假设最大流小于m，这时，应该有一个其容量小于m的截存在，例如，使S包含发点和结点I_1，…，I_K；J_1，…，J_L的这样一个截。在这k个人中无论谁都无力完成其它的工作，倘若不然，就会找到一条与该截相交的容量为m的弧。因此，截的容量等于$m-k$（由发点至闲置人员）加L（由这些工作到收点），其总的容量为$m-k+L$，在$L<K$时，此量将小于m。从而我们找到了只能完成$L<K$项工作的k个人组成的一组。若指派是不可能实现的，即流量小于m，那么，这就意味着，有某组人员阻碍了分派工作的实施。

练习8.4.4 假设每人均能完成两项工作，并且不存在三个人

具有相同专长的情况，求证在这种情况下指派是可能实现的。

练习8.4.5 假设有无穷多个人和工作，前面的人能够完成任何一项工作，而后面的第$i+1$个人仅有第i个专长。求证，每k人小组都至少能够完成k项工作，但是所有的人都分配工作却是不可能的。

简单的指派问题亦称**婚配**问题。每一个姑娘只在一定的小伙子间进行选择。为了使每一个姑娘都找到配偶，每一k个姑娘（$k=1,2,\cdots$）的小组至少应当喜爱k个小伙子这也就足够了。笔者不知道，如果小伙子也想挑选一下姑娘，会产生什么情况。如果姑娘们持有偏爱的尺度来代替简单的“行”和“不行”，如果待分工人员也有一个标度的话，即当第i个人对于第j项工作具有胜任系数a_{ij}，并且，在根本不具备相应的专长的$a_{ij}=0$情况下时，这样就导致了**最优指派**问题：在给定工作的条件下，极大化胜任系数之和。这也是一个线性规划问题：在每人分配一项工作，每项工作均安排一人去做的情况下，极大化$\Sigma\Sigma a_{ij}x_{ij}$。

另外一著名的例子，是推销员问题。从自家开始，他应访问过$n-1$个城市再回到家里。如果从一个城市i到另一个城市j的距离（或旅费）等于a_{ij}，那么，推销员应当在每一个城市访问一次的条件下，即

$$\sum_i x_{ij}=1,\quad \sum_i x_{ij}=1,\ x_{ij}\geqslant 0$$

极小化 $\Sigma\Sigma a_{ij}x_{ij}$。

这样的提法不完全得当，因为问题的解可能是几个个别的数值，每个数组可能在其间构成闭环，因此，由家里出发之后，该推销员永远也到不了所有要去的城市。所以，必须引进一些补充约束，而这些约束之多，竟使这个乍看起来很简单的问题，实际上变为非常困难的了。

与网络相联系的问题是求出一个从发点到收点的最短路径。在

每一条弧上均给定一个通过的时间t_{ij}，并考虑对偶问题：每一结点对应一个最小时间y_i，在

$$y_j - y_i \leqslant t_{ij} \qquad \text{和发点} \quad y = 0$$

的条件下，

极大化收点y。

这个问题可用动态规划的方法求解。从发点开始，我们求出到相邻结点所需的最小时间，并逐渐向前移动。如果在网络中无环，做到这一点是很容易的。动态规划中的基本原理为递归最优化原则：从发点到收点的最优路径、同时也是从发点到该路径上任一结点并从此结点到收点的最优路径。不管现状如何，在此以前所得的解应是最优的。结果，问题可分成若干简单的部分。

让我们还提一下运输问题，即无需中转而由生产者直接发往市场的网络流的问题。第i个工厂供给s_i件产品，而市场j需要d_j件，其间运送一个单位产品的运费为c_{ij}。于是，发货量x_{ij}应满足不等式

$$\sum_{j} x_{ij} \leqslant s_i, \quad \sum_{i} x_{ij} \geqslant d_j, \quad x_{ij} \geqslant 0.$$

为得到运输的最优性，我们将极小化

$$\sum\sum c_{ij} x_{ij}.$$

练习8.4.6 若练习8.4.2中的数为运输时间，那么，从发点到收点的最短路径将呈现什么样子？求所有其它结点的极小时间y_i（动态规划的特殊情况），并且说明，为什么在每一条弧上均满足不等式$y_j - y_i \leqslant t_{ij}$。

练习8.4.7 解下述运输问题：两个工厂产量$s_i = 6$，三个市场需求量$d_j = 4$，运输费用c_{ij}组成矩阵

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 3 & 6 \\ 2 & 4 & 8 \end{bmatrix}.$$

练习8.4.8 生产和需求在什么样的条件是运输问题的可行性条件？

§8.5 对策论和极小极大定理

矩阵对策，最好用例子来说明。

例1 有二人参与对策，规则对每一局都相同：

局中人X举起一只手或两只手，另一个局中人Y也独立地做这样的动作。如果他们决策一致，那么Y赢得10元；若他们采取的决策不同，则X获胜；他举一只手时，赢10元；举两只手时，赢20元。局中人X总的赢得很容易记作矩阵形式：

$$A=\begin{bmatrix} -10 & 20 \\ 10 & -10 \end{bmatrix}\begin{matrix}\text{一只手}\\ \text{两只手}\end{matrix}\quad Y.$$

一只手　两只手

X

稍加思考，就会得到一个大致的策略。显然，局中人X不会在各局都出示同样的对策，否则，局中人Y就会学着他的样子出示对策，必获全胜。同样，局中人Y也不能总出示单一的策略，不然，局中人X将出示不同的策略。两个局中人都必须采用**混合策略**。此外，在每一局中策略的选择都必须与前面各局绝对无关，不然的话，若另一局中人觉察到对方的某一个策略规律，他就会利用这一规律。甚至，“赢时一直抱定同一策略，而当第一次输过后，再变换策略”。这样的策略模式，显然也是无益的。在足够多局之后，对方就会确知你将出示怎样的策略。因此，局中人便处于下列情形之中：局中人X决策，以频率为x_1举一只手（则他以$x_2=1-x_1$的频率举两只手，并且在每一局中这个决策都是随机的），而局中人Y选择自己的概率为y_1和$y_2=1-y_1$。我们看到，这些概率中无论哪一次都不应当等于1或0，否则，对方就会调整决策而开始获胜。同时，所有概率均应为1/2吗？这也不尽然，因为，这样局中

人Y输20元的次数就会过多，（在总局数的1/4中，他每局要输掉20元，另外1/4中，每局输掉10元，半数的竞赛中每局赢得10元，即平均每局输掉2.5元。）但是，局中人Y越是倾向举两只手的策略，局中人X就越是倾向举一只手的策略。

整个问题在于**寻求一种平衡**。是否存在这样一种混合策略y_1和y_2，如果被局中人Y所一贯采用，就会迫使X丧失任何优势？类似地，局中人X能否选出这样的概率x_1和x_2，使得Y选择自己的策略没有任何意义？如果存在这样的平衡点的话，则在这一点，局中人X的平均赢得达到一个鞍点：此平均值，对X为极大，对Y为极小。求出这样的鞍点就叫做"解"对策。

局中人X的观点可以这样来阐明：由权为x_1和$1-x_1$的相应矩阵列形成新的列。例如，假设他选取权为3/5和2/5。这时列将具有下列形式：

$$\frac{3}{5}\begin{bmatrix}-10\\10\end{bmatrix}+\frac{2}{5}\begin{bmatrix}20\\-10\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2\\2\end{bmatrix}.$$

在这样的选择下，不管局中人Y的策略如何，他将输掉2元。支付仍旧为10元和20元。但是，如果局中人Y执着地举一只手，那么，他将在3/5的总局数中每局赢得10元，在2/5的总局数中每局输掉20元，这就得出平均每局输2元的结果。若Y举两只手或以任意比例出示混合策略，他还是要平均每局输2元的。

但是，这并非意味着，对局中人Y来说，所有策略都是最优的；如果他懒惰，继续举一只手，那么X就一定要改变策略，而开始每局赢得20元。这时，Y改变策略，X也将再次改变策略。若两个局中人均是有经验，则归根结底，无论是Y还是X都终将安排最优的混合策略。这就表明，局中人Y将对其权为y_1和$1-y_1$之矩阵进行组合，试图得到尽可能小的新行：

$$y_1[-10\quad 20]+(1-y_1)[10\quad -10]$$
$$=[10-20y_1\quad -10+30y_1].$$

在这种情况下，最好的策略是使两个分量相等：$10-20y_1=$

$-10+30y_1$，由此得$y_1=2/5$。在这种选择下，两个分量均等于2，新行具有〔2，2〕形式。所以，选择这样的策略，局中人Y每局的损失不可能超过2元。局中人Y极小化了自己的极大损失，这个极小极大（2元）与局中人X独立求得的极大极小是一致的。对策的值就是这个极小极大或极大极小，即2元。

这个鞍点值得注意，因为它意味着局中人X只在2/5的时间内采用其第二策略，纵然此策略给他以赢得20元的机会，亦得如此。与此同时，局中人Y被迫采用不利的策略——他本来的意愿是重复局中人X的动作。但是，这里不然，他用相反的概率2/5和3/5进行对策。可以检验，X赢得10元的频率为$3/5\cdot3/5=9/25$，赢得20元的频率为$2/5\cdot2/5=4/25$。其余的12/25则为输掉10元的频率。正如所期望的，这使他平均每局赢得2元。

下面让我们指出一个容易犯的错误。行的最优组合不总是给出相等分量的行。例如，除上述规则外，假设局中人X尚可举起三只手，此时若Y举一只手，则X赢得60元，Y举两只手，X赢80元。此时支付矩阵形式为：

$$A=\begin{bmatrix}-10 & 20 & 60\\ 10 & -10 & 80\end{bmatrix}.$$

局中人X一直都选用这个新的策略，即矩阵各列的权固定为$x_1=0$，$x_2=0$，$x_3=1$，且最小的赢得为60元。局中人Y在行组合中，选取给出具有最小分量的行的那个组合，即选择第一行，这时Y之最小损失为60元。因此，我们同样将得到极小极大和极大极小相等的结论，然而此时鞍点被移向了一角。

规则是：在行的最优组合的条件下，对于局中人Y，对策之值仅位于（正象为2元和60元的情况一样）局中人X实际所采用的那些列中。类似地，在列的最优组合之条件下，对于局中人X，同样的对策值位在属于局中人Y的最优策略的那些行内，其它诸行给出更高的值，故Y将避开它们。这个规则完全地对应于线性规划中的互补松弛条件。

练习8.5.1 如果赌注从20元增加到70元，最优策略如何变化？对策的新值等于多少（局中人X的平均赢得）？

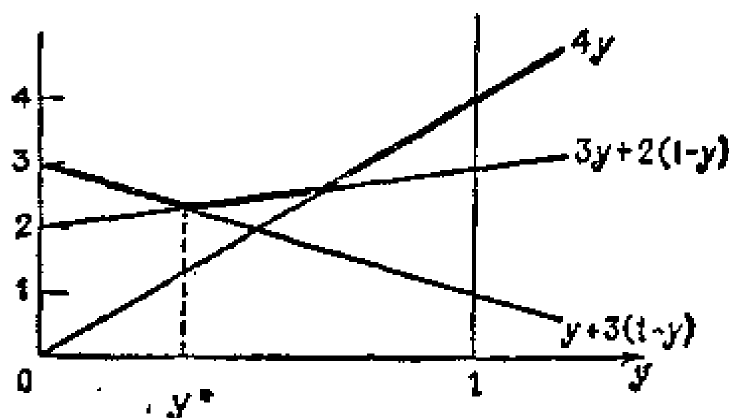
练习8.5.2 假设支付矩阵为$A=\begin{bmatrix}1 & 2\\ 3 & 4\end{bmatrix}$。说明局中人$X$如何计算自己的极大极小，而局中人$Y$如何计算自己的极小极大，最优策略$x^*$和$y^*$是怎样的？

练习8.5.3 假设某个a_{ij}是行的最大元和列的最小元。试说明，为什么局中人X总是选择第j列，而局中人Y总是选择第i行（不管矩阵的其它元素是什么？）求证，在上一练习中矩阵包含这样的元素。最后建立一个不包含它的矩阵。

练习8.5.4 若

$$A=\begin{bmatrix}3 & 4 & 1\\ 2 & 0 & 3\end{bmatrix}$$

用组合权为y和$1-y$之行的方法，求局中人Y的最好策略，并且画出所有三个分量。局中人X将抱定最大的分量（粗线），而Y则应极小化这个极大。此极小极大（虚线）的高度如何，y^*等于什么？



练习8.5.5 矩阵A同上，求局中人X的最好策略，求证他仅用两列（第一列和第三列）并且相应的直线在极小极大点相交。

练习8.5.6 如果

$$A=\begin{bmatrix}1 & 0 & -1\\ -2 & -1 & 2\end{bmatrix},$$

求两个最优策略和对策的值。

练习8.5.7 假设 $A=\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$，什么样的权 x_1 和 $1-x_1$ 会给出 $\begin{bmatrix} u \\ u \end{bmatrix}$ 形式之列？什么样的权 y_1 和 $1-y_1$ 会给出新的行 (V, V)？求证 $u=v$。

极小极大原理

最一般的矩阵对策，与我们上述的简单例子几乎丝毫不差，只是有重要的一点例外：局中人X有n种可能选择，而Y有m种可能选择。所以每一局都有不变的支付矩阵A，具有m行和n列。其每一元素a_{ij}均为局中人Y选择了第i个策略的同时，局中人X选择第j个策略时之赢得。负元素只不过意味着负的支付，即Y赢得。结果与具有零和的二人对策完全一样：一个局中人输掉的恰是另一个局中人赢得的。但是，现在平衡鞍点存在与否却远非显而易见的事情。

正如前面所举的例子中那样，局中人X可以选择任意的混合策略$x=(x_1, x_2, \cdots, x_n)$。这个策略永远是一个概率向量：各$x_i$均为非负量，而且它们的和等于1。这些分量代表着$n$个不同纯策略的频率，并且在每一局中，局中人$X$通过某种随机手段——为产生频率为$x_i$的策略$i$所建立的手段——对这些策略进行选择。与此同时，局中人y应当采取类似的决策：他选取满足条件$y_i \geqslant 0$和$\Sigma y_i=1$的行向量$y=(y_1, y_2, \cdots, y_m)$，该向量即代表着其混合策略的频率。

预言一局的结果是不可能的，因为它是随机的。然而，平均起来，局中人X出示第j个策略，与Y出示第i个策略的组合将有概率$x_j y_i$，即两个单个的概率的乘积。如果实现了这一组合，那么赢得即为a_{ij}。于是，对于局中人X从该特定组合的赢得期望值为$a_{ij}x_j y_i$，而一局总的赢得期望值为$\Sigma\Sigma a_{ij}x_j y_i$。我们再一次强调指出，任一或所有元素$a_{ij}$均可为负，对$X$和对$Y$规则相同，并且决定谁胜谁负的乃是$a_{ij}$各元素。

赢得期望值可比较容易地写成矩阵形式，因为二重和$\sum\sum a_{ij}x^j y_i$等于yAx，这是由矩阵的乘法规则得到的：

$$yAx=(y_1\cdots y_m)\begin{pmatrix}a_{11} & a_{12}\cdots a_{1n}\\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ a_{m1} & a_{m2}\cdots a_{mn}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\ x_2\\ \vdots\\ x_n\end{pmatrix}$$

$$=a_{11}x_1y_1+\cdots+a_{mn}x_ny_m$$

局中人X试图极大化，而局中人Y试图极小化的正是此yAx。

例 2 假设A是一个n阶单位矩阵：$A=I$。此时，赢得的期望值等于$xIy=x_1y_1+\cdots+x_ny_n$，这一对策的思想不难阐明：局中人X设法作与Y一样的选择，因为在这种情况下，他得到$a_{ii}=1$元，与此同时，局中人Y设法作另外一种选择，以免局中人X得胜，即Y不作任何支付：单位矩阵对角线外之诸元素均为零。如果X选择第i列，那么Y就选择另外第j行。若局中人X选择某一个策略比任何其它策略更为经常，那么Y就有更多的机会避免败北。所以最优策略将是$x^*=(1/n,\ 1/n,\ \cdots,\ 1/n)$，同理，局中人Y不可能特别强调任何一个确定的策略，否则，X必将发现这点并从而夺得优势，因此，其最优选择也是等概率的，且这概率之和为1，即$y^*=(1/n,\ 1/n,\ \cdots,\ 1/n)$。两个局中人均选择策略 i 的概率等于$(1/n)^2$，所有这样的组合的和即为X所获赢得的期望值。总的对策值为$n\times(1/n)^2$或$1/n$，这可通过计算来证实：

$$y^*Ax^*=\left[\frac{1}{n}\cdots\frac{1}{n}\right]\begin{pmatrix}1 & & \\ & 1 & \\ & & \ddots \\ & & & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{n}\\ \vdots\\ \frac{1}{n}\end{pmatrix}$$

$$=\left(\frac{1}{n}\right)^2+\cdots+\left(\frac{1}{n}\right)^2$$

$$= \frac{1}{n}.$$

随着数n的增大，局中人Y将得到更多避免失败的机会。

注意，对称矩阵$A=I$并未保证此对策对两个局中人是公正的。实际上，真实情况恰恰相反：当矩阵非对称，$A^T=-A$时，对策将是完全公平的。这种矩阵使两局中人处于等同的条件之下，因为在局中人Y选择策略i时，局中人X选择策略j，会使局中人X赢得a_{ij}，而局中人Y选择策略j和局中人X选择策略i时，就会使局中人获同样的赢得a_{ij}（因为$a_{ji}=-a_{ij}$）。最优策略x^*和y^*应当一样，并且赢得的期望值应等于$y^*Ax^*=0$，在$A^T=-A$时，对策的值等于零。

例3
$$A=\begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 1 \\ -1 & -1 & 0 \end{bmatrix}.$$

对策是：两局中人X和Y均选择1至3之间的某一数。选取较小数者，赢得1元（若局中人X选取数2，Y选取的3，则X赢得为$a_{23}=$ 1元。如果他们选取同样的数，那么，这种情况将位于矩阵的主对角线上，即无人取胜。显然，任何一个局中人都不会选取2和3，否则另一个局中人即可选择更小的数1。于是纯策略$x^*=y^*=(1, 0, 0)$是最优的，两个局中人每一次都选择1且其对策的值为：

$$y^*Ax^*=a_{11}=0\ 。$$

应当指出，使所有决策保持不变的矩阵并非单位矩阵，而是每个元素e_{ij}均为1的矩阵E。E的倍数加到支付矩阵A上：$A\rightarrow A+\alpha E$，只不过意味着，局中人X每一局将赢得附加的α。对策的值增加α，但x^*和y^*依旧不变。

现在，我们回到一般理论上来，首先让我们置身于局中人X的位置。假设他选取混合策略$X=(x_1, \cdots, x_n)$。这时局中人Y将逐渐认清这个策略并进而选择自己的策略，以使损失yAx最小。结果：局中人X获$\min yAx$。有经验的局中人X一定会**使这个极小值极大化的某向量X^***（这可能不是唯一的）。作这种选择，局中人X可以确信

其赢得不会小于

$$\min_y yAx^* = \max_x \min_y yAx. \quad (14)$$

他指出赢得更多也是不可能的。

局中人Y出示相反的策略。在其任意混合策略y的情况下，他应当期望局中人X找一个极大化yAx^*的向量。所以Y应当选取使此极大值极小化，并且保证其损失绝不大于

$$\max_x y^*Ax = \min_y \max_x yAx, \quad (15)$$

的混合策y^*。局中人Y也想不出更好的主意。

但愿诸位已经领悟到，如果所有这些都是对的，结果将是怎样的。我们想使局中人X保证赢得量(14)与局中人Y的损失量(15)相一致。此时混合策略x^*和y^*将产生鞍点平衡。于是对策获解：局中人X仅在离开策略x^*的条件下才失利，局中人Y只在离开策略y^*时才失利。此鞍点的存在是冯。诺伊曼证明的。被称为：极小极大定理：

8M 对于任意的$m \times n$阶矩阵A所有混合策略的极小极大值等于极大极小值：

$$\max_x \min_y yAx = \min_y \max_x yAx. \quad (16)$$

此量为对策的值。如果，左部在x^*点达到最大，而右部在点y^*达到最小，那么，这些策略便是最优的。它们产生一个双方谁都不愿背离的鞍点。

对所有x和y有

$$y^*Ax \leqslant y^*Ax^* \leqslant yAx^*. \quad (17)$$

在鞍点，向量x^*无论如何都不会比其它任何向量x来得坏（因为$y^*Ax \leqslant y^*Ax^*$）。同理，第二个局中人，如果背离策略y^*，他就只有损失更甚。

---

* 这个向量可能与x^*不一致，若局中人Y选取不合理的策略，则X可能得到比公式(14)对其保证的还要多。在对策论中，我们假设局中人均为老手。

正如在对偶理论中那样，我们可以从单侧不等式

$$\max\ \min \leqslant \min\ \max$$

开始。这充其量只不过是x^*的定义(14)和y^*的定义(15)的组合：

$$\max_x \min_y yAx = \min_y yAx^* \leqslant y^*Ax^* \leqslant \max_x y^*Ax$$

$$= \min_y \max_x yAx. \tag{18}$$

这只不过是说，若局中人X能保证至少赢得α，而局中人Y能保证失利不超过β，则一定有$\alpha \leqslant \beta$。冯·诺伊曼的功绩在于他证明了$\alpha = \beta$。这便是极小极大定理。该定理意味着，在整个式(18)中，等式都是应该成立的，而鞍点性质(17)，在练习 8.4.6 中，便由此而来。

这里，最引人注意的是，在证明中，**引用了和线性规划中完全相同的数学方法**。从直观上讲，这几乎是显而易见的：局中人X和Y扮演着"对偶"的角色，并且两者均从概率向量之"容许集"$x_i \geqslant 0$，$\Sigma x_i = 1$，$y_i \geqslant 0$，$\Sigma y_i = 1$中选取各自的策略。最使人惊奇的是，甚至von Neumann本人也未立即觉察到两个理论是一致的。他是在1928年证明了极小极大定理的，线性规划出现于1947年之前，Gale，Kuhn和Tucker于1951年首先发表了对偶定理的证明，而这项证明正是以von Neumann的成果为基础的。他们的证明实际上恰好与Dantzig演示线性规划和矩阵对策的等效性的文章出现在同一卷中，所以，我们从对偶性中推导极小极大定理，乃是在颠倒历史发展的顺序。

概括地讲，极小极大定理可证明如下。令$b = (1, \cdots, 1)^T$为m个分量均为1的列向量，$C = (1, \cdots, 1)$为n个分量为1的行向量。让我们来研究一下对偶线性规划问题

(P) $\min cx$	(D) $\max\ yb$
条件$Ax \geqslant b$	条件$yA \leqslant c$
$x \geqslant 0$,	$y \geqslant 0$.

为应用对偶理论，我们应当确信，两问题都是可行的，所以，在必要的情况下，我们把矩阵A的各元素均加一同样大小的数α。这不会改变最优策略，因为每一项支付增加α 而Min max和Maxmin也同样增加α。对增加后的矩阵来说（我们仍旧记作A），向量$y=0$为对偶问题的容许向量，任意足够大的向量X，将是原问题的容许向量。

现在，由线性规划的对偶定理可知，存在有向量x^*和y^*，它们满足等式$cx^*=y^*b$。由于b和c都是由1组成的，故得$\Sigma x_i^*=\Sigma y^*_i$。若这两个和数均等于$\theta$，则除以$\theta$后，这些和就会都变成1，**结果混合策略$x^*/\theta$和$y^*/\theta$在对策论中是最优的**。对任何其它混合策略$x$和$y$来说，$Ax^*\geqslant b$就隐含着$yAx^*\geqslant yb=1$，且$y^*A\leqslant c$隐含着$y^*Ax\leqslant cx=1$的意思。这里最主要的一点是$y^*Ax\leqslant 1\leqslant yAx^*$。如果我们将不等式除以$\theta$，这就是说，局中人$X$战胜对方策略$y^*/\theta$的赢得不会超$1/\theta$，局中人$y$负于对方策略$x^*/\theta$的损失不会小于$1/\theta$。因此，这就是要选取的策略，故Minmax＝Maxmin＝$1/\theta$。

我们完成了对策论的讲解。但是，我们却尚未回答这样一个最自然的问题：从通常的意义上讲，什么对策真正等价于我们所讲的"矩阵对策"呢？象棋、桥牌、扑克之类的游戏是否在冯·诺伊曼的理论范畴之中？

在笔者看来，象棋不属于此范畴，其理由有二。第一，白方的策略不仅仅是由开始走子构成，它应包括对黑方的第一步，然后对其第二步如何做出反应的决策，如此等等，一直到一盘棋结束。每一步棋都有多种走法，故X可有数以十亿计的纯策略供其选择，其对方情况亦是如此。因此，数m和n都大得异乎寻常。此外，这里机会是不起什么作用的。假如白方能找到取胜之策略，或黑方能找到平局的策略（这些策略均从未有过），则象棋游戏的魅力就会大为逊色了。

与象棋不同，桥牌确实包含某些诡计要素在内，譬如，包含对某种计谋要做什么事情的决策。因此，桥牌被认为是矩阵对策。进

憾的是，m和n又是大得异乎寻常的两个数。但或许对对策的某些单个的成分，可以进行最优策略的分析。

另一方面，"黑J"*则不是矩阵对策（至少在娱乐场所是这样），因为娱乐场遵循固定的规则。当笔者的友人 Ed Thorp(艾德·索普）发现并发表了某种制胜的策略——迫使Thorp 在 Las Vegas（拉斯维格斯）改变规则——时，他的方法完全取决于对已经公开的牌的跟踪。偶然性的要素在这里是没有的。因此，不存在混合策略x^*。

还有如下所述的所谓**犯人的两种抉择问题**。两个同案犯被捕，摆在他们每人面前的都有两种抉择：他若坦白交待罪行，则将获释，但条件是其同伙拒不交待，并被判处10年徒刑。如果两个均坦白交待，则他们将分别被判处 6 年徒刑。但若二人均拒不坦白交待，那么，他们二人将被判处2年徒刑，因为已被查证的罪行不太严重。在这种情况下，怎么办？坦白交待的愿望很强烈，但如果他们互相依赖，坚不吐实，则其困境多少会有所减轻。此对策具有非零和：两者都可能受损。

普通对策，同时也是矩阵对策的最好例子要算是**扑克游戏**了。这里虚张声势乃是高明牌技的一个精彩环节，并且为了效果更好，这种虚张声势必须是不可预测的。这就是说，虚张声势的决策应该是随机做出的（这里我们接受对策论最基本的假设——对方是一个老手），否则，对方就会发现规律，并从而得胜。虚张声势成功和失败的几率将取决于已经公开的牌与赌注的大小，已经下过的以及将要下的。实际上，方案的数目又是多到异乎寻常的地步，使得寻找最优策略x^*是一件完全不现实的事情。然而，扑克游戏的高明牌手一定能够达到非常接近于x^*的策略。此策略在大大简化对策的条件下，是可以准确地计算出来的：

局中人X在发牌时得J或k的机会均等，而y则总是得到Q。在看了自己手中的牌之后，X或是放牌认输以前所下赌注1元，或是再

* 一种纸牌游戏—俄译者注。

增加赌注 2 元。若X加赌注，则Y或者可放牌认输自己原下的 1 元赌注，或者也再追加 2 元赌注，并摊牌看X是否虚张声势。在这种情况下，牌大者便赢得对方所赌的 3 元。

甚至在这样简单的对策中，可能的“纯策略”也不是那么显而易见的，但是写出这些纯策略，却是颇为有益的。Y只有两种可能性，因为它只是对X的动作做出反应：

1)若X下赌注，则Y放牌认输，

2)若X下赌注，则Y响应且试图赢得 3 元。

X有四种策略，有些合理，有些则不然：

1)手中有K则加赌注 2 元，有J则放牌认输，

2)不论在哪种情况下，均加赌注(虚张声势)，

3)不论在哪种情况下，均放牌认输 1 元，

4)手中有K，放牌认输，有J，则加赌注。

需耐心计算支付矩阵：

$a_{11}=0$，因为X在半数情况下得J，输 1 元；得K获胜(Y放牌认输)。

$a_{21}=1$，因为X半数情况输 1 元，半数情况赢 3 元(尽管X手中，但Y仍企图击败他)。

$a_{12}=1$，因为X下赌注，而Y放牌认输(虚张声势得逞)。

$a_{22}=0$，因为X有K，赢 3 元；有J，输 3 元(虚张声势失败)。

采用第三种策略，总要输 1 元，第四种策略也是不成功的。结果A将为

$$A=\begin{bmatrix} 0 & 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & -2 \end{bmatrix}.$$

在这种对策中，局中人X的最优策略乃是在半数情况下虚张声势，$x^*=(1/2,\ 1/2,\ 0,\ 0)$，而处于被动地位的局中人Y必须选择$y^*=(1/2,\ 1/2)$。对策之值等于 5 角。

以教授读者如何进行简化方案的扑克对策。这是结束本书的一

种游戏方式，但是笔者认为扑克也应在线性代数及其应用中占有一定的地位。

练习8.5.8 求矩阵

$$A=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&2&0\\0&0&3\end{bmatrix}$$

的x^*、y^*和对策值。

练习8.5.9 试计算

$$\min_{\substack{y_i\geqslant 0\\ y_1+y_2=1}} \quad \max_{\substack{x_i\geqslant 0.\\ x_1+x_2=1,}} \quad (x_1y_1+x_2y_2)$$

练习8.5.10 对(18)的每一不等式作出解释。继之，在最小极大定理把它们变为等式之后，以文字形式导出鞍点不等式(17)。

练习8.5.11 求证在扑克对策中，$x^*=(1/2,\ 1/2,\ 0,\ 0)$和$y^*=(1/2,\ 1/2)$为最优策略。为此，计算出yAX^*和y^*Ax并验证鞍点条件(17)。

练习8.5.12 是否已经证明，不可能存在一种永远使黑方获胜的象棋策略？笔者相信，只有在两局中人每次可连续走两步的情况下，这一点才是可知的。假使黑方具有获胜的策略，则白可将马跳出并跳回，然后效法获胜策略，结果就会导致双方均获胜这样一种不可能出现的结果。

练习8.5.13 如果x挑选一个系数，与此同时Y预测此数是奇数或是偶数以此决定赢或输1美元，谁占便宜？

附 录 A

线性变换，矩阵和基变换

设A是一个$m\times n$矩阵，x是一个n维向量。向量x在R^n中，而Ax在R^m中。映x为Ax的映射描述了一个由空间R^n到R^m中的变换，而且矩阵乘法的法则直接导出它的最重要的性质：对任何向量x和y，以及任何纯量b和c，

$$A(bx+cy)=b(Ax)+c(Ay) \tag{1}$$

一个具有性质(1)的变换称为是线性的，于是每个矩阵A导出一个线性变换。

在这个附录中我们的目标是研究线性变换的其它例子以及试图同时解释所有这样的变换。这个目标是研究线性代数的一种基本途径：从如(1)这样的一个性质出发，演化出它的种种推论，这当然比本书中所采取的途径要抽象的多，因此我们还是宁可直接由矩阵开始。但是现在是到了超出联立线性方程组$Ax=b$，以及它们的系数矩阵这个范围而去寻求线性变换其他例子的时候了。

首先，我们要记住确实存在与R^n，C^n不同的向量空间。一个向量空间所要求的全部东西就是某种适当的产生组合$bx+cy$的方法，它确保每个这样的组合仍在这个空间之中。

例 1 令P_n是所有次数$\leqslant n$的多项式 $p=a_0+a_1t+\cdots+a_nt^n$ 的空间。这些多项式是"向量"，而两个这样的向量之和当然也在P_n中。特殊的多项式$p_0=1$，$p_1=t$，…，$p_n=t^n$ 提供了这个空间的一组基，从而它的维数是$n+1$。

例 2 给定一个常系数n阶线性微分方程

$$\frac{d^nu}{dt^n}+c_1\frac{d^{n-1}u}{dt^{n-1}}+\cdots+c_nu=0 \tag{2}$$

它的解 $u(t)$ 构成一个向量空间S_n。对任何两个解u和v，叠加法则保证$bu+cv$也是一个解；换句话说，解可以加在一起和用纯量去乘。最简单的解是纯指数解$u=e^{\lambda t}$——或者如果λ是特征方程的二重根还有$te^{\lambda t}$，若是三重根还有$t^2e^{\lambda t}$等等。一共有n个这种特殊类型的n个解，它们构成所有解的空间的一组基*。

例 3 令H是第143页上所描述的希尔伯特空间，它包含所有向量$v=(v_1,v_2,v_3,\cdots)$它有无限多个分量，但有有限长度：

$$\|v\|^2=v_1^2+v_2^2+v_3^2+\cdots<\infty.$$

它当然没有有限基——H是无限维的——因为我们需要无限多个信息来决定u。

用这里列举的向量空间，很容易解释线性变换的想法。要记住：本质的性质是线性性；变换A可以把一个向量空间映入任何其他的向量空间（或者它本身），但是它必须满足$A(bx+cy)=b(Ax)+c(Ay)$。

例 4 在n次多项式空间上，令A是微分算子：$A=d/dt$。于是对任何多项式p，

$$Ap=A(a_0+a_1t+\cdots+a_nt^n)=a_1+2a_2t+\cdots+\cdots na_nt^{n-1} \qquad (3)$$

我们可以把A想成是P_n到较小的空间P_{n-1}或者P_n到P_n内的线性变换。在前一情形中变换是到P_{n-1}上的，P_{n-1}中每个多项式可以由P_n中一个适当的多项式通过微分而得出。在后一情形中，这并非总是成立的，因为存在这样的P_n中的多项式（像t^n）它决不会在(3)式的右边出现；我们刚刚找到的"微分矩阵"将不是可逆的。

例 5 这一次考虑一个作用在P_{n-1}上的算子。令A是积分算子：

$$A(a_0+a_1t+\cdots+a_{n-1}t^{n-1})$$
$$=a_0t+a_1\frac{t^2}{2}+\cdots+a_{n-1}\frac{t^n}{n} \qquad (4)$$

---

* 当系数c_i依赖于t时，S_n仍然是一个n维向量空间。但是它的一组基，甚至此空间的一个元素都是很难求出的。

这定义了一个由P_{n-1}到较大空间P_n的一个变换，而且它是线性的：

$$\int_0^t (bp(t)+cq(t)dt=b\int_0^t p(t)dt+c\int_0^t q(t)dt$$

积分是否是造出P_n中的一切多项式，使得映射是映上的呢？不是的，但它是 1 — 1 的：不同的多项式有不同的积分。

例 6 S_n是微分方程（2）的所有解的空间。设x是R^n中任意向量，它的分量是解u的始值：当$t=0$时

$$u(0)=x_1,\ \frac{du}{dt}(0)=x_2,\ \cdots,\frac{d^{n-1}(u)}{dt^n}(0)=x_n$$

由这些初值，我们选取出此微分方程一个特解。R^n中的x与S^n中的H之间的这种对应是这两个空间间的一个线性变换；因为一个线性方程的解线性地依赖于它的始值。这个变换是映上的且是 1 — 1 的：每个解可以由适当的始值而得出，不同的始值必定造出不同的解来。于是描述这个变换的$n\times n$矩阵是可逆的。

例 7 令A是Hilbert空间上的左移位：

$$Av=A(v_1,\ v_2,\ \cdots)=(v_2,\ v_3,\ \cdots)$$

这个移位是线性的而且是映上的；我们可以适当选取一个输入来造出任何向量作为输出。因为我们可以任意选取v_1，这个算子不是 1 — 1 的；v_1在输出中不出现，它被完全移掉了，从而有一维的核

$$A(v_1,\ 0,\ 0,\ \cdots)=(0,\ 0,\ \cdots)。$$

在这些例子中，线性性质并不引起人们验证它的兴趣，如果它存在的话，是决不可能被忽略的。无论如何，它是一个变换能具有的最重要的性质*，而且它自然地把我们引回到矩阵上来。事实上，在这个附录中我们主要的目的是证明每个线性变换可以用一个矩阵来表示。这个表示矩阵将仅依赖于我们对空间的基的选取，它是依照下列法则来构造的：

设空间V有一组基$v_1,\ v_2,\ \cdots,\ v_n$，空间W有一组基$w_1,\ w_2,\ \cdots,\ w_m$。则每个由V到W的线性变换A用一个$m\times n$矩阵〔A〕来表示。

* 可逆性大概是处在第二位的。

它的元素a_{ij}由用A作用在v_j上来决定，而且这个结果表示为w的线性组合：

$$Av_j=\sum_{i=1}^{m}a_{ij}w_i \qquad j=1,\ \cdots,\ n$$

换句话说，这个矩阵的第j列由考察这个变换如何作用在基向量v_j来确定。

例 8 设A是积分算子，以特殊多项式1，t，t^2，…作为一组基：v_j和w_j取为t^{j-1}。为了计算矩阵〔A〕，我们来观察A怎样作用在v_j上：

$$Av_j=\int_0^t t^{j-1}dt=\frac{t^j}{j}=\frac{1}{j}w_{j+1}$$

在矩阵的第j列上，仅有的非零元素a_{ij}是$\frac{1}{j}$。如果V有维数$n=4$，W将有维数$m=5$，而且5×4矩阵是

$$A=\begin{pmatrix}0&0&0&0\\1&0&0&0\\0&\frac{1}{2}&0&0\\0&0&\frac{1}{3}&0\\0&0&0&\frac{1}{4}\end{pmatrix}$$

假定我们要积分$V(t)=2t+8t^3$，则我们把V表示为

$$2t+8t^3=0v_1+2v_2+0v_3+8v_4$$

用A乘这些系数

$$A\begin{pmatrix}0\\2\\0\\8\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\\2\end{pmatrix}\text{或}\int 2t+8t^3=w_3+2w_5=t^2+2t^4$$

例 9 设A是微分算子，将P_n映入较小的空间P_{n-1}，取相同的基，A在V_j上的作用恰是

$$Av_j=\frac{d}{dt}t^{j-1}=(j-1)t^{j-2}=(j-1)w_{j-1}$$

于是〔A〕的第j个列仍然只有一个非零元素，它等于$j-1$并出现在第$i=j-1$行上。4×5的情形是

$$A=\begin{pmatrix}0&1&0&0&0\\0&0&2&0&0\\0&0&0&3&0\\0&0&0&0&4\end{pmatrix}$$

注记 我们把微分和积分看成是逆运算。或者至少积分后再微分将得出原来的函数；第二个矩阵是第一个矩阵是左逆矩阵。上述排列的两个矩阵的乘积是一个4×4单位矩阵。但是一个长方形矩阵不可能有双边逆矩阵。而且事实上另一个次序的乘积不是单位矩阵：

$$[A]_{积分}[A]_{微分}=\begin{pmatrix}0&0&0&0&0\\0&1&0&0&0\\0&0&1&0&0\\0&0&0&1&0\\0&0&0&0&1\end{pmatrix}$$

在左上角的零元素对应着下列事实：从一个常值函数出发，微分后再积分得出零。

例10 表示在希尔伯特空间上左移位的矩阵是无限大的，但是此外它没有什么特别的：

$$A=\begin{pmatrix}0&1&0&0&\cdot\\0&0&1&0&\cdot\\0&0&0&1&\cdot\\0&0&0&0&\cdot\\\cdot&\cdot&\cdot&\cdot&\cdot\end{pmatrix}$$

$$且(A)\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ \vdots \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} v_2 \\ v_3 \\ v_4 \\ \vdots \end{pmatrix}.$$

剩下的事情是证明我们构造这个矩阵的一般法则（5），并证明(A)包含了它所表示的线性变换的全部信息。换句话说，知道了V和W所选取的基，而且知道了(A)我们将能够重新构造出A在空间V的任一向量$v=\sum_1^n x_j v_j$上的作用。

如果向量x给出v用基v_1，…，v_n来表示的系数，则向量$y=(A)x$给出Av用w_1，…，w_m表示的系数。于是A在任何V上的作用用矩阵乘法重新表出：

$$Av=\sum_{i=1}^m y_i w_i=\sum_{i,j} a_{ij} x_j w_i \qquad (6)$$

在这个证明中，我们必须依赖于A的线性性：对任何$v=\Sigma x_j v_j$

$$Av=A\left(\sum_1^n x_j v_j\right)=\sum_1^n x_j A v_j$$

用表达式(5)代入Av_j，我们证明了公式(6)。给出A在一组基中每个元素上的作用，线性性就足以确定A在此空间的其它每个元素上的作用。

关于线性变换与矩阵的关系还有一点。如果A和B是线性变换，例如由V到W和由W到Z，则它们的积BA是由V到Z的一个变换：它由V中的v开始，经过W中的Av，最后以Z中的$BAv=B(Av)$结束。最后这个方程很像13页中的法则(7)，它是矩阵乘法的基础。于是非常自然的是矩阵乘法正确反映了线性变换的这个乘积：

如果矩阵(A)和(B)在V的基$\{v_i\}$，W的基$\{w_i\}$和Z的基$\{z_i\}$下表示线性变换A和B，则这两个矩阵的乘积表示了复合变换BA：

$$(BA)=(B)(A) \qquad (7)$$

几乎不需要说明这个乘积BA仍是一个线性变换——虽然它看起来象某种二次的量。可能会猜想既然$A(x)=x$且$B(x)=x$，那么乘积BA应与x^2有关，但是单位的平方是单位：$B(A(x))$仍然是x。

练习A.1 求一个3×5矩阵，它表示把P_4映入P_2（四次多项式映入二次多项式）的二阶导数d^2/dt^2。

练习A.2 对例10中的左移位，证明右移位$[A]^T$是仅有的单侧逆矩阵。$[A]$的行是正交的，但是它的列不是这样。对$n\times n$矩阵这是不可能的。

练习A.3 设$V=W=2\times2$矩阵的空间。它的基是

$$v_1=w_1=\begin{bmatrix}1&0\\0&0\end{bmatrix},\quad v_2=w_2=\begin{bmatrix}0&1\\0&0\end{bmatrix},$$

$$v_3=w_3=\begin{bmatrix}0&0\\1&0\end{bmatrix},\quad v_4=w_4=\begin{bmatrix}0&0\\0&1\end{bmatrix}$$

考虑把每个矩阵映为它的转置矩阵的变换A，用法则（5）求4×4矩阵$[A]$。为什么$[A]^2=I$？

练习A.4 在第二章的末尾，我们讨论了用固定的矩阵$\begin{bmatrix}1&0\\2&0\end{bmatrix}$乘以上述空间$V$中每个元素的变换。求表示$V$上这个变换的$4\times4$矩阵。

练习A.5 设微分方程（2）就是$d^n u/dt^n=0$。取定一组基，描述所有解的空间S_n。

练习A.6 设在$x-y$平面上，变换A把每个向量映为它关于x轴的镜像。而变换B把每个向量映为它关于原点的对称点。使用标准基向量e_1和e_2，求矩阵$[A]$，$[B]$和$[BA]$。并描述在一个向量上先应用A再应用B的作用。

基变换

设v_1，…，v_n和w_1，…，w_n是同一向量空间的两组基，而且

设一个向量v分别用两组基表示为：

$$v=\sum_{1}^{n}x_jv_j=\sum_{1}^{n}y_iw_i \qquad (8)$$

那么这两组系数之间有什么关系呢？

如果这两组基之间由下式联系着$v_j=\sum_{i=1}^{n}s_{ij}w_i$，则系数$x_j$和$y_i$用同样的系数$s_{ij}$但用不同的方式联系着：

$$y_i=\sum_{j=1}^{n}s_{ij}x_j \qquad (9)$$

较简单的证法是验证新系数y_i满足$\Sigma x_jv_j=\Sigma y_iw_i$，使得它们实际上是$v$的展开式中的系数：

$$\sum_{j=1}^{n}x_jv_j=\sum_{j=1}^{n}\sum_{i=1}^{n}x_js_{ij}w_i \text{ 等于}$$

$$\sum_{i=1}^{n}y_iw_i=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}s_{ij}x_jw_i$$

基变换也用某种方式涉及矩阵理论，这是一种相当精巧但又绝对是基本的方法（它也常常被说成是变量替换，从数学上看实际上是一回事）。假定我们取定一个由某个向量空间到自身的线性变换A，而且选取一组基w_1，…，w_n——它将用于W和$V=W$两者。则由法则$Aw_j=\Sigma a_{ij}w_i$，方程（5）造出一个相应的矩阵$[A]_w$。现在我们要问，对于同一个线性变换A，如果我们对这个空间，也就是说，对V和W，使用另一组基v_1，…，v_n，它的矩阵是怎样的？为了求出A的这个新的表示，我们令S是描述基变换的矩阵。如上所述，$v_j=\Sigma s_{ij}w_i$。

新的矩阵$[A]_v$，它是在基v_j下表示A的，与原先关于基w_i构造的矩阵$[A]_w$有如下联系

$$[A]_v=S^{-1}[A]_wS \qquad (10)$$

换句话说，基变换导出表示矩阵的一个相似变换。

由任意向量 $v=\Sigma x_j w_j$ 出发，Sx 给出它关于 w 的系数，于是 $[A]_w Sx$ 给出 Av 关于 w 的系数，而且最终 $S^{-1}[A]_w Sx$ 给出 Av 关于原来的基 v 的系数。因为这恰恰是确定 $[A]_v$ 的性质，因此(10)式的两边一定相等。

例11 设 A 是如下变换，它将任何向量 (x, y) 映为它关于 45° 直线的镜象 (y, x)，关于标准基 $w_1=(1, 0)$，$w_2=(0, 1)$，相应的矩阵容易求出，因为 A 将 w_1 映为 w_2，而且将 w_2 映为 w_1，它的矩阵是置换

$$[A]_w=\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

假定我们把平面旋转一下，使得新的基向量之一沿着 45° 直线，$v_1=(1, 1)$，而另一个与其垂直，$v_2=(-1, 1)$。则 v_1 表为 w_1+w_2，v_2 表为 $-w_1+w_2$，

$$S=\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

关于这组新基，变换 A 事实上简化了。因为 v_1 在45°直线上，它是它本身的镜象，从而 $Av_1=v_1$。另一个基向量 $v_2=(-1, 1)$ 正好被翻过来，$Av_2=-v_2$。于是

$$[A]_v=\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

这个矩阵是对角的，因为基 v_1，v_2 由 A 的特征向量组成。这些特征向量出现在"基变换矩阵" S 的列上，所以**正如第五章那样，它将A对角化**：　　$\Lambda=[A]_v=S^{-1}[A]_w S$

练习A.7 如果 v_1 为 v_2 垂直，而且 A 表示到过 v_2 的直线上的射影，矩阵 $[A]_v$ 是什么？这个（或任何其他的）射影矩阵的特征值是什么？

练习A.8 求一个矩阵，它的特征向量是 $v_1=(1, 3)$，相应特征值为 4 以及 $v_2=(2, 0)$，相应特征值为 0。

附 录 B

Jordan标准形

给一个方阵A，我们要选取M，使得$M^{-1}AM$尽可能地接近于对角的。在最简单的情形中，A有一个完全的特征向量组，而且它们成为M的列——在另外的地方记为S。它的Jordan形$J=M^{-1}AM=\Lambda$，它完全由1×1块$J_i=\lambda_i$组成，从而对角矩阵的目标完全达到。在更一般，更困难的情形中，某些特征向量丢失了从而对角化是不可能的。现在我们要谈及这种情况。

我们复述一下这个要证明的定理：

5S 如果矩阵有S个线性无关的特征向量，则它相似于一个Jordan标准形矩阵

$$J=M^{-1}AM=\begin{bmatrix} J_1 & & \\ & \ddots & \\ & & J_S \end{bmatrix}$$

其中块

$$J_i=\begin{bmatrix} \lambda_i & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & 1 \\ & & & \lambda_i \end{bmatrix}$$

这样的Jordan形矩阵的例子是

$$J=\begin{pmatrix} 8 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 8 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$
=\begin{pmatrix} \begin{bmatrix} 8 & 1 \\ 0 & 8 \end{bmatrix} & & \\ & \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} & \\ & & [0] \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} J_1 & & \\ & J_2 & \\ & & J_3 \end{bmatrix}
$$

二重特征值 $\lambda=8$ 只有一个特征向量，它沿第一个坐标方向 $e_1=(1, 0, 0, 0, 0)^T$；结果 $\lambda=8$ 只出现在一个块 J_1 中。三重特征值 $\lambda=0$ 有两个特征向量 e_3 和 e_5，它们对应着两个Jordan块 J_2 和 J_3。

关键的问题在于：如果 A 是另一个 5×5 矩阵，在什么条件下它的Jordan标准形与 J 相同？何时存在一个 M，使得 $M^{-1}AM=J$？作为第一步的要求，任何相似矩阵 A 必须具有同样的特征值 8，8，0，0，0。但这远不是充分的——具有这些特征值的对角矩阵与 J 不相似——从而我们的问题涉及特征向量。

为回答这个问题，我们把关系式 $M^{-1}AM=J$ 改写为一种较简单的形式 $AM=MJ$：

$$
A(x_1x_2\cdots x_5)=(x_1x_2\cdots x_5)\begin{pmatrix} 8 & 1 & & & \\ 0 & 8 & & & \\ & & 0 & 1 & \\ & & 0 & 0 & \\ & & & & 0 \end{pmatrix}
$$

把此乘法按一次乘一列写出

$$
Ax_1=8x_1 \qquad 及 \qquad Ax_2=8x_2+x_1 \tag{1}
$$

$$
Ax_3=0x_3 \qquad 及 \qquad Ax_4=0x_4+x_3 \qquad Ax_5=0x_5 \tag{2}
$$

现在我们可以看出关于 A 的条件。它与 J 一样必定有三个真正的特征向量。一个有特征值 $\lambda=8$，它将位于 M 的第一列，就像它位于 S 的第一列一样：$Ax_1=8x_1$。其余两个，分别记为 x_3 和 x_5，位于 M 的第三列和第五列：$Ax_3=Ax_5=0$。最后，必定还有两个特殊

的向量，"广义特征向量"x_2和x_4。我们将x_2视为属于一个向量链，它由x_1打头而且由方程（1）所描述。事实上，x_2是这个链中仅有的另一个向量，而且对应的块J_1是二阶的。方程(2)描述了两个不同的链，在其中一个中x_4跟在x_3的后面，而在另一个中只有x_5一个；块J_2和J_3分别是2×2和1×1的。

寻求A的Jordan标准形问题变成为寻求以特征向量为首的这些向量链的问题，对每个i，

$$或者Ax_i=\lambda_i x_i \qquad 或者Ax_i=\lambda_i x_i+x_{i-1} \qquad (3)$$

向量x_i置为M的列，而且每个链造出一个单独的块J。本质上看，我们必须证明对每个矩阵A，这些链可以怎样被造出来。于是若这些链满足特定的方程（1）和（2），则J将是A的Jordan标准形。

我认为发表在莫斯科大学学报第26卷上的Filippov的想法使得这种构造法尽可能地清楚又简单了。它使用数学归纳法，由如下事实开始：每个1×1矩阵也是它的Jordan标准形了。我们可以假设这个结构对于阶数小于n的所有矩阵已建立起来——这就是"归纳假设"——然后解释对于n阶矩阵的各个步骤。我们希望把对A的一般的说明与对于J的特殊的说明结合起来，于是我们从一开始就设想它们共有五个相同的特征值。

在Filippov的算法中有三个步骤

步骤1 因为特征值之一是$\lambda=0$，矩阵A是奇异的，而且它的列空间有维数$r<n$。只看这个较小的空间，归纳假设保证了Jordan形的存在——在列空间中一定存在r个无关的向量w_i使得

$$或者Aw_i=\lambda_i w_i \qquad 或者Aw_i=\lambda_i w_i+w_{i-1} \qquad (4)$$

在例子$A=J$中，秩是$r=3$，而且列空间是由e_1，e_2和e_3张成，它们将作为向量w_i，得出

$$Jw_1=8w_1,\ Jw_2=8w_2+w_1,\ Jw_3=0w_3 \qquad (5)$$

步骤2 设A的核和列空间有一个p维的交。当然，核中的每个向量是一个相应于$\lambda=0$的特征向量。于是在步骤1中必定有p个链，它们由这个特征值开始，而且我们感兴趣的是这样的w_i，它

在这些链的末端。这样p个向量中的每一个都在列向量中，所以每一个都是A的列的一个组合：对于某个y_i，$w_i=Ay_i$

在$A=J$的例子中，核包含e_3和e_5。它与列空间之交由e_3张成；于是$p=1$，在方程(5)中有一个对应$\lambda=0$的链，e_3位于这个链的末尾（也是位于开始），而且$e_3=Je_4$，于是$y=e_4$。

步骤3　核总是有维数$n-r$。于是和它与列空间之交的p维子空间无关，它必定包含$n-r-p$个附加的基向量z_i它们位于此交之外。在例子中$n-r-p=5-3-1=1$，而且化零向量$z=e_5$与列空间无关，它将是产生1×1块$J_3=(0)$的向量z。

现在我们把这些步骤放在一起给出Jordan定理：

r个向量w_i，p个向量y_i和$n-r-p$个向量z_i组成矩阵A的Jordan链，这些向量是线性无关的。它们组成M的列向量组，而且$J=M^{-1}AM$是Jordan形矩阵。

如果我们希望把这些向量重新编号成x_1，…，x_n，而且使它们适合方程(3)的条件，那么y_i应该直接写在得出它的w_i的后面，这就造出一个链，它相应于$\lambda_i=0$。那些z_i放在最后面，每个z自己组成一个链，因为它在核中，所以相应的特征值是零。具有非零特征值的块在步骤1中已经选好。具有零特征值的块在步骤2中加了一行一列，而步骤3给出1×1块$J_i=(0)$。

剩下仅有要做的事情就是证明所有w_i，y_i和z_i的集合是线性无关的，于是我们假定它们的某个组合是零：

$$\Sigma c_i w_i+\Sigma d_i y_i+\Sigma g_i z_i=0 \qquad (6)$$

用A去乘它们，并对w_i使用方程(4)

$$\Sigma c_i\begin{bmatrix}\lambda_i w_i\\ \text{或}\\ \lambda_i w_i+w_{i-1}\end{bmatrix}+\Sigma d_i A y_i=0 \qquad (7)$$

Ay_i是特殊的w_i，它在相应于$\lambda_i=0$的链的末尾，所以它们在第一个和式中不可能出现。因为(7)式是w_i的某个组合，而由归纳假设w_i是线性无关的——它们在列空间中给出Jordan标准形——我们

断言每个d_i必定为零。回到(6)，这个式子成为$\Sigma c_i w_i = -\Sigma g_i z_i$，它的左边在列空间之中，因为$z_i$与此空间是无关的，故每个$g_i$为零。最后$\Sigma c_i w_i = 0$，从而$w_i$的无关性得出$c_i = 0$。

如果原来的A不是奇异的，这三个步骤将用于$A' = A - cI$（常把c选取为使A'奇异即可，从而它可以是A的任何一个特征值）。这个算法通过将w_i，y_i和z_i造成链x_i将A'变成它的Jordan标准形$M^{-1}A'M = J'$。而对A的Jordan标准形使用相同的链及相同的M即可：

$$M^{-1}AM = M^{-1}A'M + M^{-1}cM = J' + cI = J$$

这就证明了每个A都相似于某个Jordan形矩阵J。除了这些块的排列次序以外，**它相似于唯一一个这样的J**；A有唯一的Jordan标准形。于是所有矩阵的集合被分解若干子集，它们有如下性质：在同一子集中的所有矩阵有相同的Jordan标准形，而且它们彼此由相似变换联系着，但是在不同子集中的两个矩阵都不相似。我们以此分类结束本书。

例

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

它有三重特征值$\lambda = 0$。这是267页上的矩阵。其秩$r = 2$且只有一个特征向量。在列空间中只有一个链w_1和w_2，它们恰与A的后两列是一致的：

$$A\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = 0 \qquad A\begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

或者　　$Aw_1 = 0$　　且$Aw_2 = 0w_2 + w_1$

核完全位于列空间之内，而且它由w_1张成。于是在步骤2中$p = 1$，向量y由下列方程给出：

$$Ay = w_2 = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}，它的解是 y = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

最后，链w_1，w_2和y并成矩阵M：

$$M=\begin{bmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \text{而且} M^{-1}AM=\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}=J$$

对于du/dt＝Au的应用 与通常一样，我们通过分离未知数来简化这个问题。这种分离只有当存在一个完全的特征向量系时才是完全的。并且$u=sv$。在当前情形中最好的变量替换是$u=Mv$。这就产生一个新的方程$Mdv/dt=AMv$，或$du/dt=Jv$，它已是尽可能的简单了。在每个Jordan块中，仅仅用对角线上方的1把它们联系起来。在上述例子中，只有一个块，

$$\frac{dv}{dt}=\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}v \quad \begin{matrix} da/dt=b & a=a_0+b_0t+c_0t^2/2 \\ \text{或}db/dt=c\text{或}b= & b_0+c_0t \\ dc/dt=0 & c= \quad c_0 \end{matrix}$$

这个方程组由最后一个方程组开始向上分解，而且每一步引入t的一个新的幂（一个$l\times l$块最高的幂为t^{l-1}），在这个例子及较早的5×5的例子中，J的指数函数是

$$e^{Jt}=\begin{bmatrix} 1 & t & t^2/2 \\ 0 & 1 & t \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \text{和} e^{Jt}=\begin{pmatrix} e^{8t} & te^{8t} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{8t} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & t & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

你可以看出a,b和c的系数是怎样出现在第一个指数函数之中的，而在第二个例子中，你可以验证$du/dt=Au$的全部五个“特解”。其中的三个是纯指数函数$u_1=e^{8t}x_1$，$u_3=e^{0t}x_3$和$u_5=e^{0t}x_5$，它们和以前一样恰是由A的三个特征向量组成。而其它两个是广义特征向量：

$$u_2=e^{8t}(tx_1+x_2) \qquad \text{及}u_4=e^{0t}(tx_3+x_4) \qquad (8)$$

$du/dt=Au$的最一般的解是$c_1u_1+\cdots+c_5u_5$，而且当$t=0$时适合u_0的组合仍是

$$u_0=c_1u_1+\cdots+c_5u_5\text{或}u_0=MC\text{或者}C=M^{-1}u_0$$

这仅仅意味着 $u=Me^{Jt}M^{-1}u_0$，从而在原来的公式$se^{\Lambda t}s^{-1}u_0$中的s和Λ被M和J所代替。

练习B.1 证明：基于链$Ax_1=8x_1$，$Ax_2=8x_2+x_1$，方程(8)中的特解u_2满足$du/dt=Au$

练习B.2 对上述矩阵B，使用$Me^{Jt}M^{-1}$来计算指数函数e^{Bt}，并把它与幂级数$I+Bt+((Bt)^2/2!)+\cdots$相比较。

参 考 文 献

抽象线性代数：

F. R. Gantmacher, "Theory of Matrices." Chelsea, New York, 1959.

P. R. Halmos, "Finite-Dimensional Vector Spaces." Van Nostrand-Reinhold, Princeton, New Jersey, 1958.

K. Hoffman and R. Kunze, "Linear Algebra," 2nd ed. Prenti e-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1971.

T. Muir, "Determinants" Dover, New York, 1960.

应用线性代数：

A. Ben-Israel and T. N. E. Greville, "Generalized Inverses, Theory and Applications." Wiley, New York, 1974.

R. Bellman, "Introduction to Matrix Analysis." McGraw-Hill, New York, 1960.

D. Gale, "The Theory of Linear Economic Models." McGraw-Hill, New York, 1960.

D. G. Luenberger, "Introduction to Linesr and Nonlinear Programming." Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1973.

B. Noble, "Applied Linear Algebra." Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1969.

数值线性代数：

G. Forsythe and C. Moler, "Computer Solution of Linear Algebraic Systems." Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1967.

C.L. Lawson and R.J.Hanson, "Solving Least Squares Problems." Prentice—Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1974.

G. W. Stewart, "Introduction to Matrix Computations." Academic

Press, New York, 1973.

R. S. Varga, "Matrix Iterative Analysis." Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1962.

J. M. Wilkinson, "Rounding Errors in Algebraic Processes." Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1963.

J. M. Wilkinson, "The Algebraic Eigenvalue Problem." Oxford Univ. Press, London and New York, 1965.

J. M. Wilkinson and C. Reinsch, Eds. "Handbook for Automatic Computation II, Linear Algebra." Springer, Berlin and New York, 1971.

D. M. Young, "Iterative Solution of Large Linear Systems," Academic Press, New York, 1971.

练习题答案

第一章

1.2.1　$u=3$，$v=1$，$w=0$，主元素为2，1，－5。

1.2.2　$u=1$，$v=2$，$w=3$，$z=4$。

1.2.3　换为＋1，消去法就不能进行。

1.2.4　消去时乘上去的数，第一个为 $l=c/a$，第二个为 $d-lb$。

1.2.5　每交费1元计算机给做3,600,000次运算。因而交费1元理论上可解一个 $n=10,800,000^{1/3}=221$元的方程组。交费增到1000倍，n 增到10倍。

1.2.6　第二项 $bc+ad$ 等于 $(a+b)(c+d)-ac-bd$。

1.2.7　$u=1$，$v=3$，$w=2$。

1.3.1
$$Ax=\begin{bmatrix}17\\4\\17\end{bmatrix}$$

1.3.2
$$Ax=\begin{pmatrix}-1\\6\\-4\\-1\end{pmatrix}$$和[26]。

1.3.3 记州内州外人数为 u 和 v，则

$$u_{末}=.8u_{初}+.1v_{初} \qquad A=\begin{bmatrix} .8 & .1 \\ .2 & .9 \end{bmatrix}.$$
$$v_{末}=.2u_{初}+.9v_{初},$$

(i) $\begin{bmatrix} u_{末} \\ v_{末} \end{bmatrix}=A\begin{bmatrix} 30 \\ 200 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 44 \\ 186 \end{bmatrix}$,

(ii) $\begin{bmatrix} 30 \\ 200 \end{bmatrix}=A\begin{bmatrix} u_{初} \\ v_{初} \end{bmatrix}$，从而 $\begin{bmatrix} u_{初} \\ v_{初} \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 10 \\ 220 \end{bmatrix}$.

(iii) $\begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}=A\begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}$，或 $\begin{bmatrix} .2 & -.1 \\ -.2 & .1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}=0$，

或 $u=2v$.

1.3.4 平行四边形的四个顶点为(2，1)，(0，3)，(2，4)和(0，0)。

1.3.5 $EA=\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 0 & -1 & -2 \\ 0 & 3 & 2 \end{bmatrix}$，这是经过第 1，2 两步消去之后的结果

1.3.6 $EA=\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 0 & -1 & -2 \\ 0 & 0 & -4 \end{bmatrix}$，这是经过第 1，2，3 三步消去之后的结果。

1.3.7 $EA=[0]$，乘积中有 ln 个元素，每个元素都要求进行 m 次乘法。

1.3.8 $EA=\begin{bmatrix} 13 \\ -8 \\ 2 \end{bmatrix}$.

1.3.9 ABC 是经过第 1，2 两步消去之后所得结果。

1.3.10 先由 $\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$

$$=\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$$ 得 $b=c=0$.

再由$\begin{bmatrix} a & 0 \\ 0 & d \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a & 0 \\ 0 & d \end{bmatrix}$得$a=d$。

1.3.11　$A=\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}$, $B=\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$,

$C=\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$, $D=A$,

$E=F=\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$.

1.3.12　成立；不成立；成立；不成立。

1.3.13　这一组合的权是A的第一行。

1.4.2　$A=\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 4 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 3 \end{bmatrix}=LU$；$A=L$，$U=I$。

1.4.3　$LU=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 3 & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 2 & 3 & 3 \\ 0 & 5 & 7 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$,

$c=\begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ -1 \end{bmatrix}$.

1.4.4　$\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ c/a & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a & 0 \\ 0 & (ad-bc)/a \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & b/a \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$.

1.4.5　$L=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 1 & 0 \\ 0 & -\frac{2}{3} & 1 \end{bmatrix}$, $D=\begin{bmatrix} 2 & & \\ & \frac{3}{2} & \\ & & \frac{4}{3} \end{bmatrix}$,

$U=\begin{bmatrix} 1 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 1 & -\frac{2}{3} \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$.

$$c=\begin{bmatrix}6\\3\\-4\end{bmatrix},\quad x=\begin{bmatrix}3\\0\\-3\end{bmatrix}.$$

1.4.6　这是因为$(150)^3/3$与$(150)^2$的比为50。

1.4.7　$c=\begin{bmatrix}2\\-1\\3\end{bmatrix},\quad x=\begin{bmatrix}4\\2\\3\end{bmatrix}.$

1.5.1　$u=2$，$v=-3$，$w=4$；第二、三两行交换。

1.5.2　消去法得第二方程$0u+0v=b_2-3b_1$，因而只在$b_2=3b_1$时该方程组才有解。

1.5.3　$P=\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}$，$L=I$，$D=\begin{bmatrix}2&0\\0&1\end{bmatrix}$，

$$U=\begin{bmatrix}1&\frac{3}{2}\\0&1\end{bmatrix}.$$

1.5.4　$P=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{bmatrix}.$

1.5.5　两个都是奇异的。第一个无解，第二个的解为$u=v=w=7$（或别的任何数）。

1.5.6　$C^{-1}BA^{-1}$。

1.5.7　$A^{-1}=A$，$B^{-1}=B$的转置$=\begin{bmatrix}\cos\theta&\sin\theta\\-\sin\theta&\cos\theta\end{bmatrix}.$

1.5.9　E乘A的作用是将第三行的8倍加到第一行上去；将E中的8换为－8，即为E^{-1}。

1.5.10　$A^{-1}=\dfrac{1}{ad-bc}\begin{bmatrix}d&-b\\-c&d\end{bmatrix},$

$$A^{-1}=\frac{1}{4}\begin{bmatrix}3&2&1\\2&4&2\\1&2&3\end{bmatrix}.$$

1.5.11 $A^{-1}=\begin{bmatrix} 9 & -36 & 30 \\ -36 & 192 & -180 \\ 30 & -180 & 180 \end{bmatrix}$.

1.5.12 直接消去时主元为.001，1000；列选主元消去时主元为1，－1。

1.5.13 如果主元来得大，那么在消去它下方每一个元素时，就应乘上一个比1小的数。3×3矩阵

$$A=\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 1 \\ -\frac{1}{2} & 0 & 1 \\ -\frac{1}{2} & -1 & 1 \end{bmatrix}$$

就是一个满足题目要求条件的矩阵。

1.6.1 $L=\begin{pmatrix} 1 & & & & \\ -1 & \cdot & & & \\ & \cdot & \cdot & & \\ & & \cdot & \cdot & \\ & & & \cdot & \\ & & & -1 & 1 \end{pmatrix}$，$D=I$，$U=L^T$。

1.6.2 低一阶的2×2矩阵也是对称的

$$\begin{bmatrix} d-b^2/a & e-bc/a \\ e-bc/a & f-c^2/a \end{bmatrix}.$$

1.6.3 $A=\begin{pmatrix} 1 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & -1 & 2 & -1 & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 1 \end{pmatrix}$.

1.6.4 数值法得到的解为$(u_1, u_2, u_3)=(\pi^2/8, 0, -\pi^2/8)$精确解为(1，0，－1)。

第二章

2.1.1 以整数为坐标点；平面上两根坐标轴上的点。

2.1.2　是，否，否，是，是，是。

2.1.3　$Ax=0$，$Ay=0$，则$A(cx+dy)=0$；$b\neq 0$，则解中不包含$x=0$，因而不能构成子空间。

2.2.1　$\begin{bmatrix}1 & 1\\ 0 & 0\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0 & 1\\ 0 & 1\end{bmatrix}$就不是梯阵。

2.2.2　$x+y+z=1$，$x+y+z=0$。

2.2.3　$LU=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 2 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\end{bmatrix}$。

U的前两列有主元，因而$r=2$。另外两个变量w和y是自由的。通解是

$$x=\begin{pmatrix}2w-y\\ -w\\ w\\ y\end{pmatrix}=w\begin{pmatrix}2\\ -1\\ 1\\ 0\end{pmatrix}+y\begin{pmatrix}-1\\ 0\\ 0\\ 1\end{pmatrix}.$$

2.2.4　第二个变量是基本变量（主元非零），变量u，w和y是自由的，秩是1，通解是$x=(u,\ -4w,\ w,\ y)^T$。$b\neq 0$时，方程组只在$b_2-2b_1=0$时可解，那时

$$x=\begin{pmatrix}u\\ b_1-4w\\ w\\ y\end{pmatrix}=u\begin{pmatrix}1\\ 0\\ 0\\ 0\end{pmatrix}+w\begin{pmatrix}0\\ -4\\ 1\\ 0\end{pmatrix}+y\begin{pmatrix}0\\ 0\\ 0\\ 1\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}0\\ b_1\\ 0\\ 0\end{pmatrix}$$

2.2.5　u是基本的，v是自由的，$r=1$，$x=v\begin{bmatrix}-2\\ 1\end{bmatrix}$。一般地，该方程组有解的条件为$b_1=0$，$b_3=4b_2$，$b_4=0$，解为$x=v\begin{bmatrix}-2\\ 1\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}b_2\\ 0\end{bmatrix}$。

2.2.6　消去法得$u+2v+2w=1$，$w=2$，因而v是自由的

$$\begin{bmatrix}u\\ v\\ w\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-2v-3\\ v\\ 2\end{bmatrix}=v\begin{bmatrix}-2\\ 1\\ 0\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}-3\\ 0\\ 2\end{bmatrix}.$$

2.2.7　第三个方程要求 $0=b_3-2b_1-3b_2$：秩为2。

2.2.8　$c=7$。

2.3.1　$v_1-v_2+v_3-v_4=0$。

2.3.2　行向量是线性无关的。

2.3.4　如果 $c_1(v_1+v_2)+c_2(v_1+v_3)+c_3(v_2+v_3)=0$，则 $(c_1+c_2)v_1+(c_1+c_3)v_2+(c_2+c_3)v_3=0$。由 v_1，v_2，v_3 线性无关得 $c_1+c_2=0$，$c_1+c_3=0$，$c_2+c_3=0$。由此得 $c_1=c_2=c_3=0$。因而 w_1，w_2，w_3 是线性无关的。

2.3.5　列空间是直线，是 $\begin{bmatrix}1\\3\end{bmatrix}$ 的倍数的全体；行空间也是直线，通过点(1，2)。

2.3.6　第二列，第三列是列空间的基底，最后一列等于7(第2列)—(第3列)。第一、第二两行是行空间的基底。

2.3.7　$\begin{bmatrix}1&0\\0&0\end{bmatrix}$，$\begin{bmatrix}0&1\\0&0\end{bmatrix}$，$\begin{bmatrix}0&0\\1&0\end{bmatrix}$，$\begin{bmatrix}0&0\\0&1\end{bmatrix}$ 是该空间的一个基底。梯阵生成上三角矩阵。

2.3.8　$v_1=\begin{bmatrix}1\\1\\0\end{bmatrix}$，$v_2=\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}$ 或 $v_1=\begin{bmatrix}1\\1\\1\end{bmatrix}$，

$$v_2=\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}.$$

2.3.9　设 $v_1=(1，0，0，0)，\cdots，v_4=(0，0，0，1)$ 为坐标向量。如果 W 是过(1，2，3，4)的直线，则 v_1，v_2，v_3，v_4 中的任何一个都不属于 W。

2.3.10　零维，$x=y=z=0$；一维，$x=(1，0，0)=-y$，$z=0$；二维，$x=(1，0，0)$，$y=(0，1，0)$，$z=(-1，-1，0)$；因为它们线性相关，所以它们不能生成整个空间。

2.3.12　(i)如果这 k 个线性无关向量不构成一个基底，那么我们将可以给它增加线性无关向量，使得线性无关向量的个数超过

k。矛盾。(ii)如果它不是基底，我们将可以去掉其中某几个，剩下的向量个数将少于维数 k。矛盾。

2.3.13 维数为6。

2.3.14 设 v_1, v_2, v_3 和 w_1, w_2, w_3 分别为 V 和 W 的基底，那么这六个向量必定线性相关。从而必定有它们的某个组合为零，$\Sigma c_i u_i + \Sigma d_i w_i = 0$，或 $\Sigma c_i v_i = -\Sigma d_i w_i$。这是同属于两个子空间的向量。

2.4.1 不成立，它们的维数相等。

2.4.2 第二列是 $\mathscr{R}(A)$ 的基底，第一行是 $\mathscr{R}(A^T)$ 的基底。向量 $(-2, 1)^T$ 生成左零空间，向量 $(1, 0, 0, 0)^T$, $(0, -4, 1, 0)^T$, $(0, 0, 0, 1)^T$ 是 $\mathscr{N}(A)$ 的基底。

2.4.3 第一、二两列是 $\mathscr{R}(A)$ 的基底，第一、二两行是 $\mathscr{R}(A^T)$ 的基底。向量 $(1, 0, -1)^T$ 生成左零空间，$(-1, 0, 0, 1)^T$, $(2, -1, 1, 0)^T$ 是 $\mathscr{N}(A)$ 的基底。

2.4.4 列空间的所有的第四个分量全部为零，行空间的所有的第一个分量全部为零。核由 $(1, 0, 0, 0)^T$ 生成，左零空间由 $(0, 0, 0, 1)^T$ 生成。

2.4.5 $AB=0$，即 B 的任何一列的元素以 A 的任何一行的元素为系数，其组合都为零，因而 B 的列的以 A 的任何一行的元素为系数，其组合为零。而所有这样的组合都必定在 $\mathscr{N}(A)$ 之中。

2.4.6 如果维数不因加上新的一列 b 而增加，则必 b 为 A 的列的组合，因而 $Ax=b$ 可解。

2.4.7 $d=bc/a$; $A=\begin{bmatrix} a \\ c \end{bmatrix}[1 \quad b/a]$.

2.4.8 $A=\begin{bmatrix} 2 \\ 4 \\ 0 \end{bmatrix}[1, -1]$, $B=\begin{bmatrix} 1 \\ 3 \end{bmatrix}[1 \quad 1 \quad 2]$,

$$AB=u(v^T w)z^T=\begin{bmatrix} 2 \\ 4 \\ 0 \end{bmatrix}(-2)[1 \quad 1 \quad 2]$$

$$=\begin{bmatrix} -4 & -4 & -8 \\ -8 & -8 & -16 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

2.4.10　$y=e^x$是一对一的，但它恒不为零；$z=\mathrm{tg}x$取任何值，但都不只取一次。

2.4.11　如果对A存在性成立，则$r=m$，A^T的m列就应线性无关，如果唯一性对A成立，则$r=n$，A^T的列就应生成R^n的所有向量。

2.4.12　A没有左逆矩阵；下状的所有矩阵都是它的右逆矩阵

$$C=\begin{bmatrix} 1-u \\ u \\ v \end{bmatrix}.$$

2.5.1　$\|x\|^2=21$，$\|y\|^2=18$，$x^Ty=0$。

2.5.2　(1，0)，(1，1)线性无关，但不正交；(0，0)，(1，1)正交，但不线性无关。

2.5.3　如果$(x_2/x_1)(y_2/y_1)=-1$，则$x_2y_2=-x_1y_1$，或$x_1y_1+x_2y_2=0$。

2.5.4　如果$i\neq j$，则$BB^{-1}=I$的第i行第j列处的元素为零。

2.5.5　$v_1{}^Tv_3=0$，$v_2{}^Tv_3=0$。

2.5.6　解$u+v+w=0$，$u-v=0$，得知(1，1，－2)的任何倍数都正交于题给的两个向量。正交单位向量组是(1，1，1)/$\sqrt{3}$，(1，－1，0)/$\sqrt{2}$，(1，1，－2)/$\sqrt{6}$。

2.5.7　$w_2=(0,\ 0,\ 0,\ 1)$；$v_3=(0,\ 0,\ 5,\ -4)$。

2.5.8　$V\cap W$中的任何一个向量都应该正交于它自己。

2.5.9　解$u+v+2w=0$，$u+2v+3w=0$，得所求正交补为由(1，1，－1)生成的直线。

2.5.10　$x+y-z=0$就是所要的方程组。

2.5.11　取y为b的左零空间的补。

2.5.12　向量$(2, 2, -1)$是化零空间的一个基底；$(3, 3, 3)=(1, 1, 4)+(2, 2, -1)=x_r+x_n$。

2.5.13　当且仅当x正交于V和W中的每一个向量时，它才正交于$V+W$；因而它是在$V^{\perp}$和$W^{\perp}$的交中。

2.5.15　从2到3，从3到1，从4到1和从2到5的压降都为5。从3到4没有压降，$P_3=P_4=5$。从1到跳跃了10，由此得$P_2=10$。

2.5.16　从1到3的电流是$I=3$，一半经2流回，一半经4流回，2到4无电流。

2.6.1　$V\cap W$是双对角线矩阵空间，主对角线和第一条次对角线以外的元素全都为零；维数是7。$V+W$是第一条次对角线以下的元素都为零；维数为13。V的维数为10，W的维数也为10。

2.6.2　如果$x=v+w$，且$x=v'+w'$，则$v+w=v'+w'$，或者$v-v'=w-w'$。最后这一向量同时属于V和W，因而它必为零。

2.6.3　一种可能是：W由$(1,0,0,0)$和$(0,0,1,0)$生成。连同题给的，这四个向量是线性无关的。

2.6.4　向量v_1，v_2和w_1是$V+W$的基底；$V\cap W$是一维的，它由向量v_1-v_2（$=w_1-w_2$）生成。

2.6.6　$A=\begin{bmatrix}0 & 1\\ 0 & 0\end{bmatrix}$，$B=\begin{bmatrix}0 & 0\\ 1 & 0\end{bmatrix}$，

$$AB=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}.$$

2.6.7　令$A=(0\quad 0)$，$B=\begin{bmatrix}0\\ 0\end{bmatrix}$，则$AB=(0)$，$\nu(AB)=1<\nu(A)=2$。

2.6.8　$A=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 2 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0 & 1 & 4 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\end{bmatrix}$

$$=\begin{bmatrix}1\\2\end{bmatrix}(0\quad 1\quad 4\quad 0)=\overline{L}\,\overline{U}.$$

2.6.9 $$A=P^{-1}LU=\begin{pmatrix}0&1&0&0\\1&0&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\4&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&2\\0&0\\0&0\\0&0\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}0\\1\\4\\0\end{pmatrix}(1\quad 2)=\overline{L}\,\overline{U}.$$

2.6.10 $$A=\begin{bmatrix}1&0&0\\2&1&0\\-1&2&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&3&3&2\\0&0&3&1\\0&0&0&0\end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix}1\\2\\-1\end{bmatrix}(1\ 3\ 3\ 2)$$

$$+\begin{bmatrix}0\\1\\2\end{bmatrix}(0\ 0\ 3\ 1).$$

2.6.11 秩是1；任何一个一阶子阵都可逆。

2.6.12 AB的秩$\leqslant B$的秩$\leqslant n<m$，但AB是$m\times m$的。

2.6.13 如果v_1，…，v_r和w_1，…，w_s分别为A和B的列空间的基底，则$A+B$的任何一列都是v_1，…，v_r，w_1，…，w_s的组合；它们生成$A+B$的列空间，因而它的维数就不能超过$r+$

s。

2.6.14 假定 y 在 $\mathscr{R}(B)\cap\mathscr{N}(A)$ 中，这样对某个 x 和 $Ay=0$ 有 $y=Bx$，那么 $ABx=0$，从而 x 在 $\mathscr{N}(AB)$ 中；但是这等于 $\mathscr{N}(B)$，因而 $Bx=0$。这样 $\mathscr{R}(B)\cap\mathscr{N}(A)$ 中的仅有向量是 $y=Bx=0$。

2.6.16 (i)对任何的 $B=\begin{bmatrix}0&0\\c&d\end{bmatrix}$ 都有 $AB=0$，这样就有一个二维化零空间。(ii) 如果 $B=\begin{bmatrix}a&b\\c&d\end{bmatrix}$，则 $AB=\begin{bmatrix}a&b\\2a&2b\end{bmatrix}$，这是一个二维子空间（值域）。

第三章

3.1.1 (a) $a^Tb=2\sqrt{xy}\leqslant\|a\|\cdot\|b\|=x+y$ (b) $\|x+y\|^2\leqslant(\|x\|+\|y\|)^2$ 是与 $x^Tx+2x^Ty+y^Ty\leqslant x^Tx+2\|x\|\|y\|+y^Ty$ 相同的，而后者就是Schwarz不等式 $x^Ty\leqslant\|x\|\cdot\|y\|$。

3.1.2 $O^2p=(a^Tb/a^Ta)^2a^Ta$ 把它加在方程(5)上就得出 b^Tb，它是斜边的平方。

3.1.3 $p=(a^Tb/a^Ta)\cdot a=\frac{10}{3}(1,1,1)$；另一个射影是 $(b^Ta/b^Tb)\cdot b$。

3.1.4 在两种情形下它是等式：角是 0 或 π，余弦是 1 或 -1，并且误差 bp 为零，因为 b 与它的射影 p 相同。

3.1.5 θ 是余弦为 $1/\sqrt{n}$ 的角。

3.1.6 对每个 j $|a_j|^2+|b_j|^2-2|a_j|\cdot|b_j|=(|a_j|-|b_j|)^2$，从而不能是负的。

3.1.7 A^{-1} 的转置被证明是 $(A^T)^{-1}$，如果 $A=A^T$，它与 A^{-1} 是相同的。

3.1.8 $A=\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}=A^T$，$B=\begin{bmatrix}1&0\\0&0\end{bmatrix}=B^T$，

$$AB=\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\neq(AB)^T$$.

3.1.9 令A的行数多于列数，例如$A=\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$.

3.1.10 到这些顶点的典型的射线是$v=\left(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right)$和$w=\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right)$，它有余弦$\cos\theta=v^Tw/\|w\|\cdot\|v\|=-\frac{1}{3}$.

3.2.1 $\bar{x}=151$.

3.2.2 $\bar{x}=2$.

3.2.3 $\bar{w}=\bar{v}=\frac{1}{3}$; $\bar{x}=3$.

3.2.4 $E^2=(u-1)^2+(v-3)^2+(u+v-4)^2$,
$dE^2/du=2(u-1)+2(u+v-4)$, $dE^2/dv=2(v-3)+2(u+v-4)$, $\bar{u}=1$, $\bar{v}=3$.

3.2.5 $P=\frac{1}{3}\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & -1 \\ 1 & -1 & 2 \end{bmatrix}$.

$$Pb=\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, (I-P)b=\begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \bar{x}=\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

3.2.6 (a) $(I-P)^2=I-2P+P^2=I-P$; $(I-P)^T=I-P^T=I-P$.

(b) $(P_1+P_2)^2=P_1^2+P_1P_2+P_2P_1+P_2^2=P_1+P_2$; $(P_1+P_2)^T=P_1^T+P_2^T=P_1+P_2$.

3.2.7 $(2P-I)^2=4P^2-4P+I=I$

3.2.8 $P^2=uu^Tuu^T=uu^T=P$ 因为$u^Tu=1$，uu^T对称。

3.2.9 $P=\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$; 则$P\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 0 \\ y \end{bmatrix}$.

3.2.11 $y=-\frac{3}{10}-\frac{2}{15}t$

3.2.12 $\begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \end{pmatrix}\begin{bmatrix} C \\ D \\ E \end{bmatrix}=\begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ -3 \\ -5 \end{pmatrix}$

3.3.1 $\begin{pmatrix} 1 & -2 \\ 1 & -1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}\begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix}=\begin{pmatrix} -4 \\ -3 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$

$c=2C$，$d=\sqrt{10}D$；$y=-2+t$是最佳的而且实际上经过全部四个点；$E^2=0$而且$b=p$，因为 b 在列空间中。

3.3.2 射影分别是$2a_1$和$2a_2$； $p=2a_1+2a_2$。

3.3.3 此射影是 $-a_3$； 和 $2a_1+2a_2-a_3=(0, 3, 0)$是 b 本身；到整个空间上的射影算子是单位算子。

3.3.4 $(Q_1Q_2)^T(Q_1Q_2)=Q_2{}^TQ_1{}^TQ_1Q_2=Q_2{}^TIQ_2=I$

3.3.5 $Q^T\cdot Q=(I-2uu^T)(I-2uu^T)=I-4uu^T+4uu^Tuu^T=I$ 因为$u^Tu=1$。

3.3.6 第三个列向量是$\pm(1, -2, 1)/\sqrt{6}$

3.3.7 $\|v\|^2=(x_1q_1+\cdots+x_nq_n)^T(x_1q_1+\cdots+x_nq_n)$
$=x_1{}^2q_1{}^Tq_1+\cdots+x_nq_n{}^Tq_n=x_1{}^2+\cdots+x_n{}^2$.

3.3.8 Q是正交的。

3.3.9 $q_1=a_1$，$q_2=a_2-a_1$，$q_3=a_3-a_2$。

$$A=\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}=QR.$$

3.3.10 $$\begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 4 & 5 \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} & \frac{4}{5} \\ \frac{4}{5} & -\frac{3}{5} \end{pmatrix} \begin{bmatrix} 5 & 4 \\ 0 & 3 \end{bmatrix}.$$

3.3.11 $$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 3 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 \\ \frac{2}{3} & 1/\sqrt{2} \\ \frac{2}{3} & -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{bmatrix} 3 & 3 \\ 0 & \sqrt{2} \end{bmatrix};$$

A和Q是$m\times n$的，R是$n\times n$的。

3.3.12 $\bar{x}=R^{-1}Q^Tb=\begin{bmatrix} \frac{5}{9} \\ 0 \end{bmatrix}$.

3.3.13 Q与A的列空间相同，所以$P=Q(Q^TQ)^{-1}Q^T=QQ^T$.

3.3.14 $v_3=\left(c-\frac{v_1^Tc}{v_1^Tv_1}v_1\right)-\frac{v_2^Tc}{v_2^Tv_2}v_2$，因为$v_2^Tv_1=0$.

3.3.15 $\|v\|^2=\frac{1}{2}+\frac{1}{4}+\cdots=1$.

$$\|e^x\|^2=\int e^{2x}dx=(e^2-1)/2.$$

$$\int e^xe^{-x}dx=1.$$

3.3.16 $b_1=\int y\sin x/\int\sin^2x$，如果$y=\cos x$，它的福立叶正弦系数$b_1$是零。

3.3.17 $a_0=1$，$a_1=0$，$b_1=2/\pi$。

3.3.18 x^3与偶空间1和$x^2-\frac{1}{3}$已是正交的；$\int_{-1}^{1}x^3xdx=\frac{2}{5}$,

所以下一个 Legendre 多项式是$x^3-\frac{2}{5}x$.

3.3.19 水平线 $y=\frac{1}{3}$.

3.4.1 若$A=0$，则行空间是0，$\overline{x}=0$且$A^+=0$.

3.4.2 $A=\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}(1\quad 1\quad 1)=\overline{L}\,\overline{U}$.

$$A^+=\frac{1}{6}\begin{bmatrix}1&1\\1&1\\1&1\end{bmatrix},$$

$$\overline{x}=A^+b=\frac{1}{6}\begin{bmatrix}1\\1\\1\end{bmatrix},\ A\overline{x}=\begin{bmatrix}\frac{1}{2}\\\frac{1}{2}\end{bmatrix}=p.$$

3.4.3 $A^+=A^T$，因为$Ax=b$的最小二乘解是$\overline{x}=A^Tb$.

3.4.4 $\overline{u}=\overline{v}=\frac{3}{2}$.

3.5.1 由(58)式，$\overline{x_w}=(4b_1+b_2)/(4+1)=\frac{17}{5}$.

3.5.2 如果$(c_1c_2)w^Twb=0$，或$4c_1+c_2=0$ c与b是w一垂直的；$\|b\|_w=\|wb\|=\sqrt{5}$。

3.5.3 $\overline{x_w}=\frac{8}{13}$，图3.9的倒换。

3.5.4 任何正交矩阵.

第四章

4.2.1 $\det 2A=2^n\det A$；$\det -A=(-1)^n\det A$；
$\det A^2=(\det A)^2$.

4.2.2 性质(5)和(1)包含性质(2)。

4.2.3 $\det A=20$，$\det A=5$。

4.2.4 $\det A^T=\det A$，$\det(-A)=(-1)^3\det A$，因而$\det A=-\det A$或$\det A=0$。

4.2.5 (a) 0 (b) 16 (c) 16 (d) $\frac{1}{16}$ (e) 16

4.2.7 $\det Q^T \det Q = 1$，或$(\det Q)^2 = 1$；单位立体。

4.3.1 第2，1，4，3列；偶排列，因而$|A| = 1$。

4.3.4 $|A_4| = -3$，$|A_3| = 2$，$|A_2| = -1$，$|A_n| = (-1)^n (1-n)$。

4.3.5 $|A| = 20$，$B = \begin{bmatrix} 20 & -10 & -12 \\ 0 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{bmatrix}$，$A^{-1} = B/20$。

4.4.1 $A^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$。

4.4.2 $x = 3$，$y = -1$，$z = -2$。

4.4.3 $J = r^2 \cos\phi$（$\phi = 0$是赤道）。

4.4.4 三角形$A'B'C'$与ABC的面积相等；恰是被移到了原点。

4.4.5 所有的棱都是原来的3倍。

4.4.6 主元素为2，$\frac{6}{2}$，$\frac{0}{6}$；不必进行交换，A是奇异的。

4.4.7 从$n = 2$讨论起，排列是奇，奇，偶，偶，奇，奇等等。$n+1$的情况不同于n的，只是增加n次交换，把$n+1$从右端移到左端。因而当n为偶数时，奇偶性不变；当n为奇数时，奇偶性变得跟n时相反。

4.4.8 偶

4.4.9 线性相关，因为它们的行列式为零。

第五章

5.1.1 $\lambda = 2$，$\lambda = 3$，迹$= 5$，行列式$= 6$。

5.1.2 $u = c_1 \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} e^{2t} + c_2 \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \end{bmatrix} e^{3t}$。

$$= 6\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} e^{2t} - 6\begin{bmatrix} 1 \\ -2 \end{bmatrix} e^{3t} .$$

5.1.3　$\lambda=-5$，$\lambda=-4$；特征值均减 7，特征向量不变。

5.1.4　$c_1x_1+c_2x_2+c_3x_3=\begin{bmatrix} 1 \\ 3 \\ 1 \end{bmatrix}$

或$c_1=\frac{5}{3}$，$c_2=0$，$c_3=-\frac{2}{3}$。

5.1.5　$\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$，$\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix}$，$\begin{bmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \end{bmatrix}$；

$\lambda=3$，1，2，$\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$，$\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$，$\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$。

5.1.7　若$Ax=\lambda x$，则$(A-7I)x=(\lambda-7)x$；若$Ax=\lambda x$，则$x=\lambda A^{-1}x$或$A^{-1}x=\lambda^{-1}x$。

5.1.8　选取$\lambda=0$。

5.1.11　$\det(A-\lambda I)=\det(A^T-\lambda I)$。

5.1.12　$\lambda_1=5$，$\lambda_2=-5$，$x_1=\begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}$，$x_2=\begin{bmatrix} 1 \\ -2 \end{bmatrix}$。

5.1.13　$\lambda_1=2$，$\lambda_2=0$，$\lambda_2=-2$。

5.2.1　S的列向量是x_1，x_2，x_3；$S^{-1}AS=\mathrm{diag}(0,1,3)$。

5.2.2　$A=\begin{bmatrix} -5 & 18 \\ -3 & 0 \end{bmatrix}$。

5.2.3　$\lambda=0$，0，3；S的第三个列向量是$\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$的倍数，其余的列和它正交。

5.2.4　$S^TA^T(S^{-1})^T=\Lambda^T$，所以$(S^{-1})^T$是矩阵$A^T$的特征向量矩阵。

5.2.5　$AB=S\Lambda_1S^{-1}S\Lambda_2S^{-1}=S\Lambda_1\Lambda_2S^{-1}=S\Lambda_2\Lambda_1S^{-1}$

$$=S\Lambda_2S^{-1}S\Lambda_1S^{-1}=BA;\ \text{任何}B=\begin{bmatrix}\alpha & \beta\\ \beta & \alpha\end{bmatrix}.$$

5.2.6　$R=45^\circ\text{旋转}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & -1 & 0\\ 1 & 1 & 0\\ 0 & 0 & \sqrt{2}\end{bmatrix}.$

5.2.7　$\begin{bmatrix}1 & 1\\ -1 & -1\end{bmatrix}$只有一个特征向量。

5.3.1　$u_0=\begin{bmatrix}3\\ 1\end{bmatrix}$，$c_1=\frac{3-\lambda_2}{\lambda_1-\lambda_2}$，

$c_2=\frac{-3+\lambda_1}{\lambda_1-\lambda_2}$，$F_k=c_1\lambda_1{}^k+c_2\lambda_2{}^k$，$F_{k+1}/F_k\to\lambda_1$。

5.3.2　$\begin{bmatrix}G_{k+2}\\ G_{k+1}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\\ 1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}G_{k+1}\\ G_k\end{bmatrix}.$

$\lambda_1=1$，$\lambda_2=-\frac{1}{2}$。

$$\begin{bmatrix}G_{k+1}\\ G_k\end{bmatrix}=S\Lambda^kS^{-1}\begin{bmatrix}G_1\\ G_0\end{bmatrix},$$

$$=\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & -2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1^k & \\ & (-\frac{1}{2})^k\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{2}{3} & \frac{1}{3}\\ \frac{1}{3} & -\frac{1}{3}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{1}{2}\\ 0\end{bmatrix}.$$

$$G_k=\frac{1}{3}\left[1-\left(-\frac{1}{2}\right)^k\right]\to\frac{1}{3}.$$

5.3.3　$\begin{bmatrix}3000\\ 3000\\ 3000\end{bmatrix}$，$\begin{bmatrix}18000\\ 1500\\ 1000\end{bmatrix}$，$\begin{bmatrix}6000\\ 9000\\ 500\end{bmatrix}$，$\begin{bmatrix}3000\\ 3000\\ 3000\end{bmatrix}$，

$$\begin{bmatrix} 18000 \\ 1500 \\ 1000 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 6000 \\ 9000 \\ 500 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 3000 \\ 3000 \\ 3000 \end{bmatrix}.$$

5.3.4　$A=\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{bmatrix}$ 波士顿 洛杉矶 芝加哥，$u_\infty=\begin{bmatrix} \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} \end{bmatrix}$

5.3.5　在稳定状态，每个昆虫都死了：$d_\infty=1$　$s_\infty=0$　$w_\infty=0$

5.3.6　$A=\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{4} & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}, u_\infty=\begin{bmatrix} \frac{1}{4} \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{4} \end{bmatrix}.$

5.3.7　$A^TA-I=\begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & a^2_{12}-\frac{3}{4} \end{bmatrix}$

特征值在对角线上，若$a^2_{12}<\frac{3}{4}$，两个均负。

5.3.8　当$|\alpha|>\frac{1}{2}$时不稳定，$|\alpha|<\frac{1}{2}$时稳定。

5.3.9　如果A是递增的，则有更多的产品在生产中被消耗掉，从而净增长必定放慢。

5.3.10　$A^2=\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$

$$A^3=0,(I-A)^{-1}=I+A+A^2=\begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

5.4.1　$e^{At}=Se^{\Lambda t}S^{-1}=\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} e^{-t} & \\ & e^{-3t} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}$

$$=\frac{1}{2}\begin{bmatrix} e^{-t}+e^{-3t} & e^{-t}-e^{-3t} \\ e^{-t}-e^{-3t} & e^{-t}+e^{-3t} \end{bmatrix}>0.$$

5.4.2 特征值为 $\lambda=1$ 和 $\lambda=3$，

$$u=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}e^{t}+\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\-1\end{bmatrix}e^{3t}\to\infty.$$

5.4.3 $\lambda_1=0$，$\lambda_2=-2$，$x_1=\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}$，

$$x_2=\begin{bmatrix}1\\-1\end{bmatrix},\quad u(t)=c_1x_1+c_2x_2e^{-2t}.$$

$$u_o=\begin{bmatrix}3\\1\end{bmatrix}\text{给出 } u=\begin{bmatrix}2+e^{-3t}\\2-e^{-3t}\end{bmatrix}\to\begin{bmatrix}2\\2\end{bmatrix}\text{当 } t\to\infty \text{ 时。}$$

5.4.4 替换给出 $dv/dt=Av \quad v=e^{At}v_o=e^{At}S^{-1}u_o$。

5.4.5 $e^{tA}e^{sA}=(Se^{t\Lambda}S^{-1})(Se^{s\Lambda}S^{-1})=Se^{t\Lambda}e^{s\Lambda}S^{-1}=Se^{(t+s)\Lambda}S^{-1}$
$=e^{(t+s)A}$。

5.4.6 $$\frac{d}{dt}(x_1y_1+\cdots)=\frac{dx_1}{dt}y_1+x_1\frac{dy_1}{dt}+\cdots$$
$$=\left(\frac{dx}{dt}\right)^T y+x^T\left(\frac{dy}{dt}\right).$$

5.4.7 A 有虚特征值，从而是中性稳定的。

5.4.8 A 有 $\lambda_1=\lambda_2=-1$ 当 $t=\infty$ 时，是衰减的；A^T+A 有 $\lambda_1=1$，$\lambda_2=-5$，所以当 $t=0$ 不是直接衰减的。

5.4.9 这个系统是不稳定的。

5.4.10 $$u=\begin{bmatrix}1\\0\\-1\end{bmatrix}\cos t+\begin{bmatrix}1\\-2\\1\end{bmatrix}\frac{\sin\sqrt{3}\,t}{\sqrt{3}}.$$

5.4.11 $$u=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}\cos\sqrt{6}\,t+\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\-1\end{bmatrix}\cos 2t.$$

5.4.12 $\rho^2e^{\rho t}x=-\rho Fe^{\rho t}x+Ae^{\rho t}x$ 或 $(A-\rho F-\rho^2I)x=0$。

5.4.14 $$u=\begin{bmatrix}1&1\\1&-1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\sin t&0\\0&\sin\sqrt{3}\,t/\sqrt{3}\end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{2}\begin{bmatrix} \sin t + \sin\sqrt{3}\,t/\sqrt{3} \\ \sin t - \sin\sqrt{3}\,t/\sqrt{3} \end{bmatrix}.$$

5.5.1　整个练习在单位圆的外部。

5.5.2　它是实的；它也在单位圆上；它也在单位圆上；它在半径为 2 的圆上或其内部。

5.5.4　$\|x\| = 6 = \|y\|$，$x^H y = -12$。

5.5.5

$$C = \begin{bmatrix} 1 & -i \\ -i & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & i & 0 \\ i & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & i & -i \\ -i & 1 & 0 \\ i & 0 & 1 \end{bmatrix}.\ C = C^H.$$

因为$(A^H A)^H = A^H A^{HH} = A^H A$

5.5.6　$\begin{bmatrix} 1 & i & 0 \\ i & 0 & 1 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} 1 & i & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} = U$，$Ax = 0$ 如果

x 是$\begin{bmatrix} i \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix}$的倍数的话；这个向量与$A^T$的列向量（$A$的行向量）不正交，但与$A^H$的列向量正交。

5.5.7　$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$，$x = \begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix}$，$x^H A x = i$。

5.5.8　$\lambda_1 = 1$，$\lambda_2 = -1$，$x_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ -i \end{bmatrix}$，

$$x_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix} A = x_1 x_1^H - x_2 x_2^H;$$

积$x_1^H x_2$为零，因为特征向量是正交的。（性质 3）

5.5.9 $U=\begin{bmatrix}1/\sqrt{3} & -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{6}\\ 1/\sqrt{3} & 0 & -2/\sqrt{6}\\ 1/\sqrt{3} & 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{6}\end{bmatrix}$.

$$A=0+\begin{bmatrix}\frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2}\\ 0 & 0 & 0\\ -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2}\end{bmatrix}+3\begin{bmatrix}\frac{1}{6} & -\frac{2}{6} & \frac{1}{6}\\ -\frac{2}{6} & \frac{4}{6} & -\frac{2}{6}\\ \frac{1}{6} & -\frac{2}{6} & \frac{1}{6}\end{bmatrix}.$$

5.5.10 行列式是特征值之积。

5.5.12 1不是一个特征值，因为它不是虚的。

5.5.13 $K=\begin{bmatrix}0 & 1\\ -1 & 0\end{bmatrix}$，$x=\begin{bmatrix}4\\ 5\end{bmatrix}$ $x^HKx=0$（由1′它必定是虚的，又因为K和x是实的它也是实的，因此只能为零）。

5.5.14 $K=(Z-Z^H)/2=-K^H$ 则$Z=A+K$，

$$\begin{bmatrix}3+i & 4+2i\\ 0 & 5\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}3 & 2+i\\ 2-i & 5\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}i & 2+i\\ -2+i & 0\end{bmatrix}.$$

5.5.15 $(UV)^H(UV)=V^HU^HUV=V^HIV=I$。

5.5.16 行列式是特征值的乘积，从而$\lambda_1\cdots\lambda_n$的模是$|\lambda_1|\cdots|\lambda_n|=1$；我们可以有$1\times1$矩阵$U=(i)$；

$$U=\begin{bmatrix}e^{i\theta} & 0\\ 0 & e^{i\varphi}\end{bmatrix}$$对任何有θ和φ。

5.5.17　最后一列是$(1,-2,1)/\sqrt{6}$，可乘以任何（复或实的）模1的数。

5.5.18　$A=\begin{bmatrix}0 & \\ & 2i\end{bmatrix}$，$S=\begin{bmatrix}1 & 1\\ -1 & 1\end{bmatrix}$。

$$e^{Kt}=Se^{At}S^{-1}=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1+e^{2it} & -1+e^{2it}\\ -1+e^{2it} & 1+e^{2it}\end{bmatrix};$$

当$t=0$时　$\dfrac{de^{Kt}}{dt}=\begin{bmatrix}i & i\\ i & i\end{bmatrix}=K$。

5.5.19　A的对角元素为1或-1；有八种可能性。

5.6.1　$C=(M')^{-1}BM'=(M')^{-1}M^{-1}AMM'$，

或$C=(MM')^{-1}\cdot A\cdot(MM')$

与I相似的矩阵只有$M^{-1}IM=I$。

5.6.2　(3.1)元素是$g\cos\theta+h\sin\theta$，当$t\cos\theta=-g/h$时它为零。

5.6.3　令$M=A$；则$M^{-1}(AB)M=BA$相似于AB。如果它们的特征值相同，则它们的和即：迹也相同。如果AB和BA有相同的迹，则$AB-BA$的迹为零，从而不能等于I。

5.6.4　$\lambda_1=-1$具有单位特征向量$(1,1)^T/\sqrt{2}$，它将置于U的第一列，而第二列$(-1,1)^T/\sqrt{2}$使得U成为酉矩阵，则$T=U^{-1}AU=\begin{bmatrix}-1 & -7\\ 0 & 2\end{bmatrix}$。T有另外的可能；用7代替$-7$或者把2与$-1$互换。

5.6.5　$T=\begin{bmatrix}0 & \pm 2\\ 0 & 0\end{bmatrix}$。

5.6.6　$p(T)=\begin{bmatrix}0 & * & *\\ 0 & * & *\\ 0 & 0 & *\end{bmatrix}\begin{bmatrix}* & * & *\\ 0 & 0 & *\\ 0 & 0 & *\end{bmatrix}$

$\begin{bmatrix}* & * & *\\ 0 & * & *\\ 0 & 0 & 0\end{bmatrix}=0$，所以$P(A)=0$。

5.6.7 $U=\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{6} & 1/\sqrt{3} \\ 0 & -2/\sqrt{6} & 1/\sqrt{3} \\ -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{6} & 1/\sqrt{3} \end{pmatrix}$

前两列也可以是$x_1=(1,\ -1,0)^T/\sqrt{2}$ $x_2=(1,\ 1,\ -2)^T/\sqrt{6}$（或很多其它的可能性）但总要有

$$x_1x_1^H+x_2x_2^H=I-x_3x_3^H=\frac{1}{3}\begin{bmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ -1 & -1 & 2 \end{bmatrix}.$$

5.6.8 (i)$TT^H=U^{-1}AUU^HA^H(U^{-1})^H=I$ (ii)若T是三角的又是酉的，则它的对角元素（特征值）必定是模1的，从而若列向量是单位向量，那么对角线上方元素必定为零。

5.6.9 $$A=\begin{bmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{bmatrix}.$$

5.6.11 若 $N=U\Lambda U^{-1}$，则$NN^H=(U\Lambda U^{-1})(U\Lambda U^{-1})^H=U\Lambda\Lambda^HU^H=U\Lambda^H\Lambda U^H=(U\Lambda U^{-1})^H(U\Lambda U^{-1})=N^HN$。

5.6.12 当$m_{11}=m_{32}$，$m_{21}=m_{31}=m_{33}=0$时，$BM=MJ_2$

5.6.13 $M^{-1}T_3M=0$，所以后两个不等式是明显的：$MJ_1=J_2M$使M的第一列为零，所以它不能是不可逆的。

5.6.14 J_1是4×4块；J_2是3×3和1×1矩阵；T_3是2×2和2×2矩阵；J_4是2×2，1×1和1×1矩阵；J_5是四个1×1块$=0$。J_2和J_3各有两个特征向量。

第六章

6.1.1 $ac-b^2=2-4=-2$；$f=(\sqrt{2}x+\sqrt{2}y)^2-y^2$。

6.1.2 否，否，是（非定，正半定，非定，正定）。

6.1.4 二次导数矩阵具有如下形式$\begin{bmatrix} 4 & -5 \\ -5 & 12 \end{bmatrix}$（极小），$\begin{bmatrix} -2 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$（极大）。

6.2.1　半定，半定，正定：$x^T Bx=(u+w)^2+v^2$。

6.2.2　如果$\alpha=-\beta=-\frac{2}{3}$，$\det A=1+2\alpha^2\beta-\beta^2-2\alpha^2<0$。

6.2.3　若矩阵A有正特征值λ_i，则矩阵A^2之诸特征值等于λ_i^2，而矩阵A^{-1}之各特征值等于$1/\lambda i$，它们均为正值；用条件Ⅱ。

6.2.4　若$x^T Ax>0$，$x^T Bx>0$，则$x^T(A+B)x>0$；条件Ⅰ。

6.2.5　$A=\begin{bmatrix}1 & 0\\ -\frac{1}{2} & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}2 & \\ & \frac{3}{2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & -\frac{1}{2}\\ 0 & 1\end{bmatrix}$

$$=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}\begin{bmatrix}1 & \\ & 3\end{bmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix},$$

$$\text{故}W=\sqrt{D}L^T=\begin{pmatrix}\sqrt{2} & -\frac{1}{\sqrt{2}}\\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}\text{或}W=\sqrt{\Lambda}Q^T$$

$$=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} & -\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}.$$

6.2.6　$R=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1+\sqrt{3} & 1-\sqrt{3}\\ 1-\sqrt{3} & 1+\sqrt{3}\end{bmatrix}$,

$$R^T=Q(\sqrt{\Lambda})^T Q^T=R,$$

$R^2=Q\sqrt{\Lambda}Q^TQ\sqrt{\Lambda}Q^T=Q\Lambda Q^T=A$（因为$Q^TQ=I$）。

6.2.8　$x^H Ax=x^H(\alpha+i\beta)x$，若左侧实部为正，则$x^H\alpha x$之实部亦为正；因此，$\alpha>0$。另一方面，矩阵$A=\begin{bmatrix}1 & 3\\ 0 & 1\end{bmatrix}$具有正

特征值，但A^H+A不是正定矩阵。

6.2.9 若对所有非0向量x，均有$x^TAx<0$；所有$\lambda_i<0$；矩阵A_K行列式之符号交替变换（并非$\det A_K<0$！）；负主元；$A=-W^TW$，则矩阵A为负定的。

6.2.10 $\lambda_1=1$，$\lambda_2=4$，两半轴通过（±1，0）和（0，$\pm\frac{1}{2}$）。

6.2.11 $A=\begin{bmatrix}3 & -\sqrt{2}\\ -\sqrt{2} & 2\end{bmatrix}$，特征值为1和4。

6.2.12 一个0特征值使椭球变成平行于第三轴之无限长的椭圆柱$\lambda_1y_1^2+\lambda_2y_2^2=1$；两个0特征值给出两个平面$y_1=\pm1\sqrt{\lambda_1}$；三个0特征值导致等式$0=1$（图形不存在）。

6.3.1. $W=\sqrt{D}\ L^T=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}2 & -1 & -1\\ 0 & \sqrt{3} & -\sqrt{3}\\ 0 & 0 & 0\end{bmatrix}$；

$$x^TAx=\left(\sqrt{2}\ u-\frac{\sqrt{2}}{2}v-\frac{\sqrt{2}}{2}w\right)^2$$

$$+\left(\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}}v-\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}}w\right)^2；表$$

面为一圆柱（参阅练习6.2.12）。

6.3.3 矩阵$C^TAC=\begin{bmatrix}4 & -2\\ -2 & 1\end{bmatrix}$，和$A$本身一样，具有正的和0特征值；$C(t)=\begin{bmatrix}2-t & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}$。

6.3.4 矩阵A之最后一个主元为负，但矩阵$A+2I$之所有主元均为正。

6.3.5 $(\sqrt{3}-1 \quad 1)\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1+\sqrt{3} \\ -1 \end{bmatrix}=0$；

$u_o=\begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}$，$a_1=\frac{1}{2}$，$a_2=-\frac{1}{2}$；较小之质量可移至$\sqrt{3}$位置，而较大之质量将永远移不出其初始位移1之范围。

6.3.6. $\lambda_1=54$，$\lambda_2=\frac{54}{5}$，$x_1=\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$，$x_2=\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$.

6.3.7. $A=\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$，$B=\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$，$|A-\lambda B|=-\lambda^2-1$，$\lambda=\pm i$。

6.4.1 $P=x_1^2-x_1x_2+x_2^2-x_2x_3+x_3^2-4x_1-4x_3$；

$\partial P/\partial x_1=2x_1-x_2-4$，$\partial P/\partial x_2=-x_1+2x_2-x_3$，

$\partial P/\partial x_3=-x_2+2x_3-4$。

6.4.2 $\partial P_1/\partial x=x+y=0$，$\partial P_1/\partial y=x+2y-3=0$，$x=-3$，$y=3$。$P_2$ 无极小值（令$y\to\infty$），且对应于非定矩阵 $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$.

6.4.3 最小化Q导致正规方程$A^TAx=A^Tb$。

6.4.4 $R(x)=a_{11}$，故$\lambda_1=\min R(x)\leqslant a_{11}$；$x=e_i$ 给出 $R(x)=a_{ii}\geqslant\lambda_1$。

6.4.5 最小值为$R(x)=1$，其中$x=(1,1)$。

6.4.6 因为对所有非0向量x均有$x^TBx>0$，故数$x^T(A+B)X$将大于x^TAx。

6.4.7. 若$(A+B)x=\theta_1x$，

$$则\lambda_1+\mu_1\leqslant\frac{x^TAx}{x^Tx}+\frac{x^TBx}{x^Tx}=\theta_1.$$

6.4.8 极大值等于$\frac{3}{2}$.

6.4.9 因为$\lambda_1=\lambda_2=1$，故μ_1应等于1；足球（橄榄球）。

6.4.10　当消去两行和两列时，$\lambda_{min} \leqslant$原始λ_3。

6.4.11　$\mu_2=3.2<3<2+\sqrt{2}$。

6.4.12　极限子空间S_j是由前j个特征向量生成的。

6.4.13　在与向量z正交的子空间S_j上取极大值。

6.4.14　令$x=(1,\ 0,\ \cdots,\ 0)^T$，则$\lambda_1 \leqslant R(x)=a_{11}/b_{11}$。

6.5.1.　$b_j=h$（图6.6中V_4下之面积）；方程组

$$Ay=b\text{为}\frac{-y_{j-1}+2y_j-y_{j+1}}{h}$$

$$=\frac{-(x-h)+(x-h)^2+2x-2x^2-(x+h)+(x+h)^2}{2h}$$

$$=h\ 。$$

6.5.2　$P(y)-P(b)=\frac{1}{2}y^Ty-y^Tb+\frac{1}{2}b^Tb$

$$=\frac{1}{2}\|y-b\|^2;$$

在测试函数上最小化$p(y)$的同时，我们也最小化了$P(y)-P(b)$，即至b之距离。

6.5.3　$\Lambda_1=54/5>\lambda_1=\pi^2$。

6.5.4　由极小极大原理得知，λ_2为所有二维子空间上λ_{max}之最小值；Λ_2可使此最小值有所增大，因为相应的二维子空间应当位于试验函数空间之内。

第七章

7.2.1　若矩阵Q为正交的，则$\|Q\|=\max\|Qx\|/\|x\|=1$，因为Q对每一个x保持长度：$\|Qx\|=\|x\|$。矩阵Q^{-1}也是正交的。且其范数等于1，故$c(Q)=1$。

7.2.2　关于向量的三角不等式给出$\|Ax+Bx\| \leqslant \|Ax\|+\|Bx\|$，且当我们将每项均除以$\|x\|$并使其最大化时，我们将得到矩阵范数的三角形不等式。

7.2.3 根据矩阵范数之定义，我们有 $\|ABx\| \leqslant \|A\| \|Bx\|$，由此得 $\|Bx\| \leqslant \|B\| \|X\|$。除以 $\|x\|$，并使之最大化，我们得到不等式 $\|AB\| \leqslant \|A\| \|B\|$。对于逆矩阵，也是如此，$\|B^{-1}A^{-1}\| \leqslant \|B^{-1}\| \|A^{-1}\|$。将这些不等式相乘，得 $c(AB) \leqslant c(A)c(B)$。

7.2.4 $\|A^{-1}\| = 1$，$\|A\| = 3$，$c(A) = 3$；取 $b = x_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$，

$$\delta b = x_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

7.2.5 根据范数定义，我们有 $\|A\| = \max \|Ax\| / \|x\|$；若将所研究的特征向量选作 x，则 $\|Ax\| = |\lambda| \|x\|$ 且比值等于 $|\lambda|$。

7.2.6. $A^T A = \begin{bmatrix} 1 & 100 \\ 100 & 10001 \end{bmatrix}$，$\lambda^2 - 10002\lambda + 1 = 0$，

$\lambda_{max} = 5001 + (5001^2 - 1)^{1/2}$。范数等于此量之平方根，且与 $\|A^{-1}\|$ 是一致的。

7.2.7 矩阵 $A^T A$ 和 AA^T 具有相同的特征值（甚至在矩阵 A 为退化矩阵的极端情况亦是如此），最大特征值等式给出 $\|A\| = \|A^T\|$。

7.2.8 因为 $A = W^T W$，$A^{-1} = W^{-1}(W^T)^{-1}$，故 $\|A\| = \|W\|^2$，$\|A^{-1}\| = \|(W^T)^{-1}\|^2 = \|W^{-1}\|^2$。（根据上题，转置矩阵具有同样的范数）。因此，$c(A) = (c(W)^2)$。

7.2.9. $\begin{bmatrix} 0.01 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 100 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.01 & 1 \\ 0 & -100 \end{bmatrix}$；$c(A)$ 接近于 1，而 $c(L)$ 和 $c(U)$ 近于 10^4。

7.2.10 若 $x = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$，则 $Ax = \begin{bmatrix} -1 \\ 7 \end{bmatrix}$，$\|Ax\|_\infty / \|x\|$。

$=7$；这是极限情况，所以$\|A\|_\infty=7$。

7.3.1. $u_0=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$，$u_1=\begin{bmatrix}2\\-1\end{bmatrix}$，$u_2=\begin{bmatrix}5\\-4\end{bmatrix}$，

$$u_3=\begin{bmatrix}14\\-13\end{bmatrix},\quad u_\infty=\begin{bmatrix}1\\-1\end{bmatrix}.$$

7.3.2. $u_0=\begin{bmatrix}3\\4\end{bmatrix}$，$u_1=\frac{1}{3}\begin{bmatrix}10\\11\end{bmatrix}$，$u_2=\frac{1}{9}\begin{bmatrix}31\\32\end{bmatrix}$，

$$u_3=\frac{1}{27}\begin{bmatrix}94\\94\end{bmatrix};\ \text{位移}\ \alpha=\frac{26}{25},$$

$$u_1=\frac{25}{49}\begin{bmatrix}24&25\\25&24\end{bmatrix}\begin{bmatrix}3\\4\end{bmatrix}\approx\begin{bmatrix}172\\171\end{bmatrix}.$$

7.3.3. $Hx=x-(x-y)\dfrac{2(x-y)^Tx}{(x-y)^T(x-y)}=x-(x-y)=y$.

为证明等式$Hy=x$，应当或将x，y交换位置，或讨论等式$H(Hx)=$
$=Hy$并利用关系式$H^2=I$。

7.3.4. $\lambda=5$，$v=\begin{bmatrix}8\\4\end{bmatrix}$，$H=\frac{1}{5}\begin{bmatrix}-3&-4\\-4&3\end{bmatrix}$.

7.3.5. $U=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&-\frac{3}{5}&-\frac{4}{5}\\0&-\frac{4}{5}&\frac{3}{5}\end{pmatrix}=U^{-1}$，

$$U^{-1}AU=\begin{pmatrix}1&-5&0\\-5&\frac{9}{25}&\frac{12}{25}\\0&\frac{12}{25}&\frac{16}{25}\end{pmatrix}.$$

7.3.6. $\begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix} = Q_0R_0 = \frac{1}{\sqrt{5}}\begin{bmatrix} 2 & 1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix} \times$

$\frac{1}{\sqrt{5}}\begin{bmatrix} 5 & -4 \\ 0 & 3 \end{bmatrix}$,

$A_1 = R_0Q_0 = \frac{1}{5}\begin{bmatrix} 14 & -3 \\ -3 & 6 \end{bmatrix}$.

7.3.7. $\begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ \sin\theta & 0 \end{bmatrix} = QR = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix} \times$

$\begin{bmatrix} 1 & \cos\theta\sin\theta \\ 0 & -\sin^2\theta \end{bmatrix}$;

$$RQ = \begin{bmatrix} \cos\theta(1+\sin^2\theta) & -\sin^3\theta \\ -\sin\theta^3 & -\sin^2\theta\cos\theta \end{bmatrix}$$

7.3.8 矩阵A为正交矩阵，故$Q=A$，$R=I$，又重新得$RQ=A$。

7.3.9 设$(Q_0\cdots Q_{K-1})(R_{K-1}\cdots R_0)$为矩阵$A^K$之$QR$分解，当$K=1$时，这在任何情况下都是正确的。根据给图得$A_{K+1}=R_KQ_K$，即$R_K=A_{K+1}Q_K^T=Q_K^T\cdots Q_0^TAQ_0\cdots Q_KQ_K^T$。左侧乘以$(R_{K-1}\cdots R_0)$并利用我们所做之假设，得$R_K\cdots R_0=Q_K^T\cdots Q_0^TA^{K+1}$。将矩阵$Q$移至等式左侧，便得矩阵$A^{K+1}$欲求之结果。

7.4.1. $D^{-1}(-L-U) = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \end{bmatrix}$,

$$\mu = 0,\ \pm\frac{1}{\sqrt{2}};$$

$$(D+L)^{-1}(-U) = \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{8} & \frac{1}{4} \end{bmatrix},$$

特征值0，0，$\frac{1}{2}$；$\omega_{opt} = 4-2\sqrt{2}$，$\lambda_{max} = 3-2\sqrt{2} \approx 0.2$。

7.4.2　矩阵J在与主对角线相毗邻的对角线上之数为$\frac{1}{2}$，其余各处均为0；$Jx_1=\frac{1}{2}(\sin 2\pi h, \sin 3\pi h+\sin\pi h, \cdots)=(\cos\pi h)x_1$。

7.4.3　$Jx_k=\frac{1}{2}(\sin 2k\pi h, \sin 3k\pi h+\sin k\pi h, \cdots)$

$$=(\cos k\pi h)x_k。$$

7.4.4　圆心为a_{ii}之圆，如果其半径r_i小于$|a_{ii}|$的话，是不会到达0的；因此，0不是特征值且对角占优矩阵不可能是退化的。

$$7.4.5.\quad J=-\begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ 0 & 0 & \frac{1}{4} \\ \frac{2}{5} & \frac{2}{5} & 0 \end{pmatrix};$$

各半径等于$r_1=\frac{2}{3}$，$r_2=\frac{1}{4}$；$r_3=\frac{4}{5}$；各圆的圆心位于0点，故所有之$|\lambda_i|<1$。

第八章

本书第八章主要是根据俄译本转译的。原作者为俄译者提供了该章原文之补充修改稿，本稿中之问题，这里没有给出答案——译者注。

8.1.1　角位于(0，6)，(2，2)，(6，0)等诸点；见图8.4。

8.1.2　$x+y$在点(2，2)最小，价值等于4；$3x+y$在点(0，6)最小，在这点价值等于6；当$x=0$，$y\to\infty$时，$x-y$之最小值为$-\infty$。

8.1.3　约束条件给出了$(2x+5y)+2(-3x+8y)\leqslant 9-10$，即$31y\leqslant -1$，而这与条件$y\geqslant 0$是矛盾的。

8.1.4　取x与y相等，且足够大。

8.1.5　不等式$x\geqslant 0$，$y\geqslant 0$，$x+y\leqslant 0$只有一个容许点

$(0,0)$。

8.1.6 容许集为平面 $x+y+z=1$ 中之一等边三角形，其角位于点 $(x, y, z)=(1, 0, 0)$, $(0, 1, 0)$, $(0, 0, 1)$；最后一角给出最大值为 3。

8.2.3 $r=[1, 1]$，故角为最优者。

8.2.4 $r=[3, -1]$，故矩阵下之第 2 列进基；此列为 $u=\begin{bmatrix}0\\-1\end{bmatrix}$ 且向量 $B^{-1}u=\begin{bmatrix}-2\\-1\end{bmatrix}$ 为负，所以，棱具有无限长度，最小价值等于 $-\infty$。

8.2.5 在点 P 有 $r=[-5, 3]$；在点 Q，有 $r=[5/3, -1/3]$ 在角点 R 有 $r\geqslant 0$。

8.2.6 (a) $x=0$，$w=6$ 时是非负的，满足方程 $Ax+w=b$ 并且是一个基，因为 $x=0$ 补充 n 个 0 分量。(b) 辅助问题是在条件 $x_1\geqslant 0$，$x_2\geqslant 0$，$w_1\geqslant 0$，$x_1-x_2+w_1=3$ 之下最小化 w_1。第一阶段向量 $x_1=x_2=0$，$w_1=3$；其最优向量为 $x_1^*=3$，$x_2^*=w_1^*=0$。最优角点在 $x_1=3$，$x_2=0$ 处，容许集为过此点且斜率为 1 的一条直线。

8.2.7 终止准则为 $r\leqslant 0$；若该准则不满足，且第 i 个分量为最大，则矩阵 F 的相应列进基；规则8C对于离基向量是同样的。

8.3.1 在条件 $y_1\geqslant 0$，$y_2\geqslant 0$，$2y_1+y_2\leqslant 1$，$3y_2\leqslant 1$ 下，极大化 $4y_1+11y_2$；$x_1^*=2$，$x_2^*=3$，$y_1^*=\frac{1}{3}$，$y_2^*=\frac{1}{3}$，价值 $=5$。

8.3.2 在条件 $x_1\geqslant 0$，$x_2\geqslant 1$ 下，极小化 $3x_1$；$y_1^*=0$，$y_2^*=3$，$x_1^*=1$，价值 $=3$。

8.3.3 在对偶问题中，我们在条件 $y_i\geqslant c^T$ 之下极大化 y^Tb；向量 $y=c$ 和 $x=b$ 为容许向量并给出相同的值 cb，故根据8F，它们应该是最优的。如果 $b_1<0$，则最优解 x^* 变为 $(0, b_2, \cdots, b_n)^T$ 和 $y^*=(0, c_2, \cdots, c_n)^T$。

8.3.4　$A=(-1)$，$b=(1)$，$c=0$ 为不容许的；在对偶问题中，我们在条件$y\geqslant 0$ 和 $-1y\leqslant 0$ 之下极大化y，此问题是无界的。

8.3.5　$b=(0,\ 1)$，$c^T=(-1\quad 0)$。

8.3.6　如果x很大时，那末$Ax\geqslant b$，$x\geqslant 0$；若$y=0$，则 $yA\leqslant c$且$y\geqslant 0$。因此，两问题均为容许的。

8.3.7　因为$cx=3=y^Tb$，根据8F，x和y为最优。

8.3.8　$Ax=(1\ 1\ 3\ 1)^T\geqslant b=(1\ 1\ 1\ 1)^T$，对于第三分量有严格不等式；因而$y$的第三分量应当为0。同理，$yA=(1\ 1\ 1\ 1)\leqslant c=(1\ 1\ 1\ 3)$，严格不等式使$x_4=0$。

8.3.9　$x^*=\binom{1}{0}=y^*$，$(y^*)b=1=cx^*$；$Ax^*\geqslant b$和$y^*A\leqslant c$之第二不等式是严格不等式，因此，y^*和x^*中之第二分量为0

8.3.10　$Ax=b$导致$yAx=yb$，这与不等式$y\geqslant 0$是否成立无关。$yA\leqslant c$同上一样导致$yAx\leqslant cx$，这是因为$x\geqslant 0$，相比之下，我们得$yb\leqslant cx$。

8.3.13　诸列构成在x轴之正方向和直线$x=y$之间的一个圆锥。在第一种情况下，$x=(1,2)^T$；$y=(1,1)^T$满足所选之可能性。

8.3.14　矩阵

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

之列。

8.3.15　令 $y=\begin{bmatrix} 2 \\ -1 \end{bmatrix}$；则$A^Ty=0$，$y^Tb\neq 0$。

8.3.16　令 $y=\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$；则$A^Ty\geqslant 0$，$y^Tb<0$。

8.3.17　$A^Ty\geqslant 0$ 使$y^TA\geqslant 0$，由此得$y^TAx\geqslant 0$；另一方面，$Ax\geqslant b$使$y^TAx\leqslant y^Tb<0$。

附录A

$$A.1\quad [A]=\begin{bmatrix}0&0&2&0&0\\0&0&0&6&0\\0&0&0&0&12\end{bmatrix}$$

A.2 $[A][A]^T=I$但是$[A]^T[A]$的(1,1)元素为零。v的第一个分量被左移位零化，就像微分中的常数一样。

A.3 转置令v_1和v_4不变，而v_2与v_3互换：

$$[A]=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$$ $[A]^2=I$ 因为转置的转置为原矩阵。

$$A.4\quad [A]=\begin{bmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\2&0&0&0\\0&2&0&0\end{bmatrix}.$$

A.5 任何解都是$(n-1)$次多项式，所以$S_n=P^{n-1}$其基为1，t，$\cdots$，t^{n-1}。

$$A.6\quad A=\begin{bmatrix}1&1\\0&-0\end{bmatrix},\quad B=\begin{bmatrix}-1&0\\0&-1\end{bmatrix}$$

$$[BA]=\begin{bmatrix}-1&0\\0&1\end{bmatrix}$$=关于y轴的镜反射。

$$A.7\quad A=\begin{bmatrix}0&0\\0&1\end{bmatrix};$$ 一个射影的所有特征值为0或1。

$$A.8\quad A=\begin{bmatrix}1&2\\3&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}4&0\\0&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&2\\3&0\end{bmatrix}^{-1}$$

$$=\begin{bmatrix}0&\frac{4}{3}\\0&4\end{bmatrix}.$$

附录B

B.1 $\frac{dH^2}{dt}=8e^{8t}(tx_1+x_2)+e^{8t}x_1$。

$Au_2=e^{8t}(tAx+x_2)=e^{8t}(8tx_1+8x_2+x_2)$.

B.2 $e^{Bt}=\begin{bmatrix} 1 & t & 2t \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}=I+Bt$因为$B^2=0$。

名词英汉对照表

A

Adjugate matrix, 转置伴随矩阵
Algebraic multiplicity, 代数重数
Almost periodic, 概周期的
Alternating direction, 交替方向
Alternative, 交错的
Angle, 角
Area, 面积
Arithmetic mean, 算术平均值
Associative law, 结合律
Attainable, 可达的
Average error, 平均误差
Axes of ellipse, 椭圆轴

B

Back-substitution 回代;反向代入
Band matrix, 带状矩阵
Bandwidth, 带宽
Basic solution, 基本解
Basic variables, 基本变量
Basis, 基底;基
Block multiplication, 分块相乘
Block power method, 分块幂法
Boolear algebra, 布尔代数
Buniakowsky, 布涅可夫斯基

C

California, 加利福尼亚
Cauchy, 柯西

Cauchy-Hamilton, 柯西-哈密尔顿
Change of basis, 基变换
Change of variables, 变量替换
Characteristic equation, 特征方程
Characteristic polynomial, 特征多项式
Chess, 象棋
Cholesky, 乔勒斯基
Coefficient matrix, 系数矩阵
Cofactors, 余子式
Column space, 列空间
Combination of columns, 列的组合
  linear, 线性组合
Commuting matrices, 交换矩阵
counter example, 反例
  symmetric, 对称
Complementary slackness, 互补松弛性
Complete pivoting, 完全旋转
Completing square, 完全平方
Complex numbers, 复数
Complex vectors, 复向量
Compound interest, 复利
Condition, 条件
Cone, 锥
Congruence transformation, 合同变换
Conjugate, 共轭
Conjugate gradients, 共轭梯度
Conjugate transpose, 共轭转置
Conservative, 保守
Constraint, 约束
Consumption matrix, 消费矩阵
Convergence factor, 收敛因子
Coordinate vectors, 坐标向量

Corner, 角
Correlation, 相关性
Cosine, 余弦
Cost function, 价值函数
Coupling term, 耦合项
Covariance, 协方差
Cramer's rule, 克莱姆法则
Crout, 柯劳特
Cycling, 循环

D

Dantzig, 坦兹克
Defective matrix, 亏矩阵
Degeneracy 退化
Dependence, 相关
Determinant, 行列式
 formulas for, 行列式公式
 properties of, 性质
Diagonal matrix, 对角矩阵
Diagonalization, 对角化
Diagonally dominant, 对角占优
Diet problem, 饮食问题
Difference equation, 差分方程
Differential equation, 微分方程
Diffusion, 扩散
Dimension, 维数
 of fundamental spaces, 基本空间的维数
Direct sum, 直和
Distance, 距离
Distinct eigenvalues, 相异特征值
Distributive law, 分配律
Dual problem, 对偶问题
Duality theory, 对偶理论

E

Echelon form,	阶梯形
Economics,	经济的
Edge,	棱，边
Eigenspace,	特征空间
Eigenvalues,	特征值
distinct,	相异特征值
repeated,	重特征值
Eigenvector,	特征向量
generalized,	广义特征向量
Elementary matrices,	初等矩阵
Elementary operation,	初等变换，初等运算
Elimination	消元法
Gauss-Jordan,	高斯—若当消元法
Gaussian,	高斯消元法
Ellipsoid,	椭球面
Epidemic,	传染
Normal equations,	正规方程
Equilibrium.	平衡的
Error,	误差
Even permutation,	偶排列
Exchange,	交换
Existence,	存在
Expansion in cofactors,	余子式展开
Exponential.	指数

F

Factor analysis,	因子分析
Factorization	因子分解
LDU,	LDU分解
LU,	LU分解
$\bar{L}\ \bar{U}$,	$\bar{L}\ \bar{U}$ 分解
QR,	QR分解

$Q_1\Sigma Q_2^T$,	$Q_1\Sigma Q_2^T$分解
Feasible set,	可行集
Fibonacci,	斐波那契
Finite differences,	有限差分
Filippov,	菲利波夫
Finite elements,	有限元
Fix,	菲克斯
Floating point,	浮点
Forsythe,	福斯兹
Forward substitution,	前向替换
Fourier series,	富里哀级数
Fredholm,	弗雷德霍姆
Free variables,	自由变量
Frequency,	频率
Function space,	函数空间
Fundamental subspaces,	基本子空间
Fundamental theorem,	基本定理

G

Gale,	加利
Galois,	伽罗华
Game theory,	对策论
Gauss,	高斯
Gauss-Jordan,	高斯一若当
Gauss-Seidel,	高斯一塞德尔
Gaussian elimination,	高斯消元法
General solution,	一般解
Generalized eigenvalue problem,	广义特征值问题
Generalized inverse,	广义逆
Genes,	基因
Geometric multiplicity,	几何重数
Gerschgorin,	吉斯伽林
Givens,	吉温斯

Gram-Schmidt, 克莱姆—施米特

H

Halfspace, 半空间

Heat equation, 热方程

Hermite, 埃尔米特

Hessenberg, 海森堡

Hessian matrix, 海森矩阵

Hilbert matrix, 希尔伯特矩阵

Hilbert space, 希尔伯特空间

Hockney, 豪柯尼

Householder, 豪斯豪德

Hurwitz, 赫尔兹

I

Idempotent matrix, 幂等矩阵

Identity matrix, 单位阵

Ill-conditioned, 病态

Imaginary number, 虚数

Immediate decay, 直接的衰减

Incidence matrix, 关联矩阵

Inconsistent, 不相容的

Indefinite, 不定的

Independence, 独立，无关

Infinite dimensions, 无限维的

Influence coefficient, 影响系数

Inhomogeneous term, 非齐次项

Initial-value problem, 初值问题

Inner product, 内积

  complex, 复内积

  of functions, 函数内积

  weighted, 加权内积

Input-output, 投入—产出

Interest, 利息

Interpolation, 插值
Intersection, 交
Inverse, 逆
  formula for, 逆的公式
  generalized, 广义逆
  of products, 乘积的逆
  of transpose, 转置的逆
Inverse power method, 逆幂法
Invertible, 可逆的
Irreversibility, 不可逆性
Isomorphism, 同构
Iterative method, 迭代法
Iterative refinement, 迭代精度

J

Jacobi, 雅可比
Jacobian, 雅可比行列式
Jordan form, 若当形

K

Kernel, 核
Kirchhoff, 基尔霍夫
Kuhn-Tucker, 库恩-塔克

L

Lagrange multiplier, 拉格朗日乘子
Law of inertia, 惯性定律
LDU factorization, LDU分解
Least squares, 最小二乘
  weighted, 加权最小二乘
Least squares fit, 最小二乘拟合
Left-inverse, 左逆
Left nullspace, 左零空间
Left nullvector, 左零向量
Legendre, 勒让德

Length, 长度

- weighted, 加权长度

Leontief, 里昂捷夫

Linear combination, 线性组合

Linear dependence, 线性相关

Linear independence, 线性无关、线性独立

Linear programming, 线性规划

Linear transformation, 线性变换

Linearity, 直线性

Lower triangular, 下三角

LU factorization, LU分解

$\bar{L}\bar{U}$ factorization, $\bar{L}\bar{U}$分解

Luenberger, 勒贝格

Lyapunov, 里雅普诺夫

M

Markov process, 马尔可夫过程

Masses, 质量

Matrix, 矩阵

- adjugate, 转置伴随矩阵
- band, 带状矩阵
- coefficient, 系数矩阵
- consumption, 消耗矩阵
- correlation, 相关矩阵
- defective, 有缺陷的矩阵
- exponential of, 指数函数的矩阵
- Hermitian, 埃尔米特矩阵
- Hessenberg, 海森堡矩阵
- Hilbert, 希尔伯特矩阵
- idempotent, 幂等矩阵
- identity, 单位矩阵
- ill-conditioned, 病态矩阵
- incidence, 关联矩阵

Jordan,	若当矩阵
nonnegative,	非负矩阵
nonsingular,	非奇异矩阵
normal,	正规矩阵
orthogonal,	正交矩阵
payoff,	支付矩阵
positive definite,	正定矩阵
projection,	射影矩阵
representing,	表示矩阵
semidefinite,	半定矩阵
similar,	相似矩阵
singular,	奇异矩阵
skew-Hermitian,	斜埃尔米特矩阵
skew-symmetric,	斜对称矩阵
square root of,	矩阵的平方根
symmetric,	对称矩阵
transpose,	转置矩阵
triangular,	三角阵
tridiagonal,	三对角矩阵
unitary,	酉矩阵
Maximin,	极大极小值
Maximum,	极大值
Mean,	平均值
Methane,	甲烷
Minimax,	极小极大值
Minimax theorem,	极小极大定理
Minimum,	极小
Minimum principle,	极小原理
Minor,	子式
Mixed strategy,	混合策略
Modulus,	模
Multiplication	乘法

Multipliers, 乘数

Multivariate analysis, 多元分析

N

Negative definite, 负定的

Network, 网络

Neutrally stable, 中性稳定

Newton's law, 牛顿定律

Noble, 诺贝尔

Nonlinear, 非线性的

Nonnegative matrix, 非负矩阵

Nonnegative solution, 非负解

Nonsingular, 非奇异

Nontrivial, 非平凡

Norm, 范数

Normal equation, 正规方程

Normal matrix, 正规矩阵

Normal modes, 正规方式

Nullity, 零度

Nullspace, 化零空间

Numerical integration, 数值积分

O

Odd permutation, 奇排列

Ohm, 欧姆

One-to-one, 一、一的（1-1的）

Onto, 映上的

Operation count, 计算量

Optimal vector, 最优向量

Optimality condition, 最优性条件

Orthogonal basis, 正交基

Orthogonal complement, 正交补

Orthogonal eigenvectors, 正交特征向量

Orthogonal matrix, 正交矩阵

Orthogonal subspaces, 正交子空间

Orthogonal vectors, 正交向量

Orthogonalization, 正交化

Orthonormal, 标准正交的

Orthonormal eigenvectors, 标准正交特征向量

Oscillation, 振幅，振动

Overdetermined system, 超定组

Overrelaxation, 超松弛

P

Primal problem, 原始问题

Principal components, 主分量

Pancake, 薄烤饼

Paraboloid, 抛物面

Parallelepiped, 平行六面体

Partial pivoting, 部分选主元

Particular solution, 特解

Partitioning, 分块

Payoff, 支付

Penrose, 潘若思

Permutation, 置换

Permutation factor P, 置换因子

Permutation matrix, 置换矩阵

  determinant of, 置换矩阵的行列式

Perpendicular, 垂直

Phase Ⅰ, 第Ⅰ演段（第Ⅰ阶段）

Phase Ⅱ, 第Ⅱ演段（第Ⅱ阶段）

Pivots, 主元

  formula for, 主元的公式

  product of, 主元的乘积

  in simplex method, 单纯形法中的主元

Plane rotation, 平面旋转

Poker, 扑克游戏

Q

R

Rayleigh quotient, 瑞利商

Rayleigh-Ritz, 瑞利—里兹

Real space, 实空间

Real versus complex, 实的与复的对比

Reflection, 反射

Regression, 回归

Reinsch, 瑞迟

Repeated eigenvalues, 重特征值

Representing matrix, 表示矩阵

Rescaling, 重新标度

Right-inverse, 右逆元

Rotation, 旋转

  of earth, 地球的旋转

  plane, 旋转平面

Roundoff, 舍入

Row exchange, 行交换

Row rank = column rank, 行秩 = 列秩

Row-reducec echelon form, 行化简阶梯形

Row space, 行空间

S

Saddle point, 鞍点

Scalar, 纯量

Schur, 舒尔

Schwarz inequality, 许瓦尔兹不等式

Semidefinite, 半定的

Separating hyperplane, 隔离超平面

Shacow prices, 影子价格

Shift, 推移，移位，

Similar matrices, 相似矩阵

Similarity transformation, 相似变换

Simplex method, 单纯形法

Simultaneous diagonalization, 同时对角化

Singular matrix, 奇异矩阵
Singular value, 奇异值
Skew-Hermitian, 斜埃尔米特
Skew-symmetric, 斜对称
Slack variable, 松弛变量
Solvable, 可解的
Space, 空间
Span, 生成
Spectral radius, 谱半径
Spectral theorem, 谱定理
Square root, 平方根
Stable, 稳定的
Standard basis, 标准基
Stationary point, 平稳点
Statistics, 统计
Steady state, 定常状态
Stopping test, 终止准则
Straight line fit, 直线拟合
String of vectors, 向量链
Submatrix, 子矩阵
Subspace, 子空间
    fundamental, 基本子空间
Sum of spaces, 空间的和
Sum of squares, 平方和
Sunflower, 向日葵
Superdecay, 超衰减
Sylvester, 西勒维斯特
Symmotric elimination, 对称消元法
Symmetric matrix, 对称矩阵

T

Tableau, 表
Tetrahedron, 四面体

Trace, 迹

Transition matrix, 转移矩阵

Transpose, 转置

  determinant of, 转置矩阵的行列式

  of inverse, 逆矩阵的转置矩阵

Triangle inequality, 三角不等式

Triangular matrix, 三角矩阵

Tridiagonal, 三对角

Trivial solution, 平凡解

U

Uncertainty principle, 不可靠性原理

Underdetermined, 不确定的

Union, 并

Uniqueness, 唯一性

Unit circle, 单位圆

Unit vectors, 单位向量

Unitary matrix, 酉阵

Unstable, 不稳定的

Upper trapezoidal, 上梯形

Upper triangular, 上三角

V

Value, 值

Vandermonde, 范德蒙

Variance, 方差

Vector, 向量

Vector space, 向量空间

Volume, 体积

von Neumann, 冯.诺伊曼

W

Wave equation, 波动方程

Weak duality, 弱对偶性

Weight, 权

Y

Z